

Applicatietest voor Gunningscriteria [n.a.v. NVI 4](#)

Introductie

Aqualysis is het laboratorium van vijf waterschappen en voert in hun opdracht diverse analyses uit. Het laboratorium speelt een essentiële rol in het waarborgen van de waterkwaliteit door onderzoek te doen op uiteenlopende watergerelateerde matrices, zoals oppervlaktewater, afvalwater, grondwater, waterbodems, en slib. De verkregen data zijn van cruciaal belang voor het aansturen van zuiveringsprocessen en het monitoren van de toestand van het watersysteem.

Om een volledig beeld van de waterkwaliteit te verkrijgen, is Aqualysis voornemens het laboratorium uit te breiden met target-, suspect-, en non-target screening via hoge-resolutie massaspectrometrie (HRMS). Dit instrument zal worden ingezet voor de screening van verschillende watermatrices, waarbij gevoeligheid, betrouwbaarheid, reproduceerbaarheid, en datakwaliteit centraal staan. Daarnaast zal het HRMS-systeem worden gebruikt voor methodeontwikkeling voor kwantitatieve analyses, het oplossen van analytische vraagstukken, kwantitatieve analyses voor het ondersteunen van target-, suspect-, en non-target workflows, en het identificeren van onbekende componenten.

Om de geschiktheid van potentiële meetsystemen te beoordelen, wil Aqualysis een representatieve sample set laten analyseren. De sample set bestaat uit twee onderdelen: enerzijds een kwantitatieve analyse van PFAS in negatieve modus, en anderzijds een kwalitatieve analyse in positieve modus van milieuverontreinigingen zoals bestrijdingsmiddelen, medicijnresten, forensische stoffen, en antibiotica.

Onderdeel 1. Kwantitatieve analyse van PFAS.

Aqualysis zal een geprepareerde en ready-to-inject sample set aanleveren voor evaluatie. De componenten in deze sample set zijn opgelost in water/methanol ~~98:2 1:1 met 0.1% mierenzuur~~. De unknown ~~bevat hetzelfde oplosmiddel, is gecentrifugeerd en verdund 1:1 met methanol + 0.2% mierenzuur (0.1% mierenzuur in vial)~~. Deze vials zijn ready-to-inject en pretreatment of toevoegingen zijn niet toegestaan.

Kaders analysemethode (verplicht):

De LC-MS methode dient ten minste aan de volgende punten te voldoen.

- Electrospray Ionisatie (negatieve modus).
- LC Injectievolume: 50 µL.
- Kolom diameter: 2.1 mm
- LC Flow rate: Tussen 0.2 en 0.4 mL/min.
- LC Solvent A en B mogen bevatten (andere solventen en additieven zijn niet toegestaan): Water, Methanol, Acetonitril, Ammonium Acetaat, Ammonium Formaat, Mierenzuur, Azijnzuur, Ammonium Hydroxide.
- Gebruik delay kolom (tussen pomp en injector): toegestaan.
- Maximale tijd injectie tot injectie: 25 min.
- MRM-type acquisitie.
 - Alle MRMs dienen het volledige retentietijdbereik opgenomen te worden.
- MS maximale cycle tijd: 0.6 s.

Een voorbeeldmethode (niet verplicht):

Kolom: Waters ACQUITY PREMIER CSH C18 1.7 µm, 2.1 x 100 mm.

Solvent A: Water 95% / Methanol 5%, + 2 mM NH₄Ac.

Solvent B: Methanol + 2 mM NH₄Ac.

Flow: 0.3 mL/min.

Kolom temperatuur: 25 °C.

Injectievolume: 50 µL.

Gradient:

Tijd (min)	%A	%B
0.0	100	0
2.5	60	40
12.0	20	80
13.0	0	100
17.0	0	100
21.0	100	0

Componenten:

Component	Afkorting	Formule	Precursor <i>m/z</i>	Fragment (verplicht)	Fragment <i>m/z</i>	Blank (ng/L)	STD 1 (ng/L)	STD 2 (ng/L)	STD 3 (ng/L)	STD 4 (ng/L)	STD 5 (ng/L)	STD 6 (ng/L)	STD 7 (ng/L)	STD 8 (ng/L)
Perfluorobutanoic Acid	PFBA	C ₄ HF ₇ O ₂	212,97920	[C ₃ F ₇] ⁻	168,98937	0	2	8	32	128	512	2048	8192	N.A.
Perfluorobutanesulfonic acid	PFBS	C ₄ HF ₉ O ₃ S	298,94299	[O ₃ S] ⁻	79,95736	0	0,5	2	8	32	128	512	2048	8192
Perfluorohexanoic acid	PFHxA	C ₆ HF ₁₁ O ₂	312,97281	[C ₅ F ₁₁] ⁻	268,98298	0	0,5	2	8	32	128	512	2048	8192
Perfluorohexanesulfonic acid	PFHxS	C ₆ HF ₁₃ O ₃ S	398,93660	[O ₃ S] ⁻	79,95736	0	0,5	2	8	32	128	512	2048	8192
Perfluorooctanoic acid	PFOA	C ₈ HF ₁₅ O ₂	412,96643	[C ₇ F ₁₅] ⁻	368,97660	0	0,5	2	8	32	128	512	2048	8192
Perfluorooctanesulfonic acid	PFOS	C ₈ HF ₁₇ O ₃ S	498,93022	[O ₃ S] ⁻	79,95736	0	0,5	2	8	32	128	512	2048	8192
Perfluorodecanoic acid	PFDA	C ₁₀ HF ₁₉ O ₂	512,96004	[C ₉ F ₁₉] ⁻	468,97021	0	0,5	2	8	32	128	512	2048	8192
Perfluorodocanesulfonic acid	PFDS	C ₁₀ HF ₂₁ O ₃ S	598,92383	[O ₃ S] ⁻	79,95736	0	0,5	2	8	32	128	512	2048	8192
Hexafluoropropylene Oxide Dimer Acid	HFPO-DA	C ₆ HF ₁₁ O ₃	284,97790	[C ₃ F ₇] ⁻	168,98937	0	0,5	2	8	32	128	512	2048	8192
N-Methylperfluorooctanesulfonamide	N-MeFOSA	C ₉ H ₄ F ₁₇ NO ₂ S	511,96185	[C ₄ F ₉] ⁻	218,98618	0	0,5	2	8	32	128	512	2048	8192
6:2 Fluorotelomersulfonic acid	6:2 FTS	C ₈ H ₅ F ₁₃ O ₃ S	426,96790	[HSO ₃] ⁻	80,96519	0	0,5	2	8	32	128	512	2048	8192
2-Perfluorohexyl ethanol (6:2)	6:2 FTOH	C ₈ H ₅ F ₁₃ O	423,02713	[C ₂ H ₃ O ₂] ⁻	59,01385	0	2	8	32	128	512	2048	8192	N.A.

- De weergegeven fragmenten (*m/z*) zijn verplicht om te meten. Aanvullende fragmenten mogen optioneel worden meegenomen.
- Voor elke component dient de integratie plaats te vinden op het extracted ion chromatogram van het betreffende fragment.

Injectievolgorde (verplicht):

Injectie	Oplossing
1	Blank 1
2	STD 1
3	STD 1
4	STD 1
5	STD 1
6	STD 1
7	STD 2
8	STD 3
9	STD 4
10	STD 4
11	STD 4
12	STD 4
13	STD 4
14	STD 5
15	STD 6
16	STD 7
17	STD 8
18	Blank 2
19	Blank 2
20	Onbekende
21	Blank 3

*STD 1, STD 4, en Blank 2 zijn herhaalde injecties uit hetzelfde monsterflesje.

Rapportage bevat tenminste:

- Volledige Analysemethode op maximaal 2 A4.
- Precursor massa en massa afwijking (ppm).
- Fragment massa en massa afwijking (ppm).
- Piekoppervlakten.
- Lineariteit, r^2 , (weging $1/x$, niet geforceerd door 0, lineair). Maximaal 1 punt mag als outlier worden weggestreept.
- Concentratie in Onbekende (ng/L).
- %RSD op berekende concentratie in STD 1.
- %RSD op berekende concentratie in STD 4.
- Duidelijke afbeeldingen van alle pieken, inclusief integratie.
- Datum en tijd injecties.
- Grootte totale datafile van acquisitie (alle 21 injecties samen).

Onderdeel 2. Target-, Suspect-, en Non-Target Screening.

Aqualysis zal een geprepareerde, injectieklare monsterset aanleveren. Deze set bestaat uit gecentrifugeerde grondwater-, oppervlaktewater-, en afvalwatermonsters, waaraan doelbewust componenten zijn toegevoegd.

Aqualysis vraagt om een analysemethode waarbij target-, suspect-, en non-targetdata binnen één LC-MS-methode worden verzameld, met verschillende dataverwerkingsstrategieën voor de benaderingen.

Analysemethode (verplicht):

Kolom: Agilent Zorbax Eclipse Plus C18 (narrow bore RR), 2.1 x 150 mm, 3.5 µm.

**Aqualysis kan deze kolom op verzoek beschikbaar stellen voor deze test. Kolom binnen 7 dagen na applicatietest retourneren aan Aqualysis.*

Solvent A: Ultrapure water + 0.1% mierenzuur.

Solvent B: Methanol + 0.1% mierenzuur.

Flow: 0.3 mL/min.

Kolom temperatuur: 40 °C.

Injectievolume: 100 µL.

Gradient:

Rt (min)	%A	%B
0.0	98	2
1.0	98	2
20.0	2	98
25.0	2	98
25.1	98	2
35.0	98	2

Source: Electrospray ionization (positieve modus).

Massa bereik full scan: m/z 100 tot tenminste m/z 1000.

Maximale MS cyclus tijd: 0.6 s.

MS/MS modus: DDA of DIA.

Massa bereik MS/MS: Ondergrens van m/z 50.

MS acquisitie: 0 tot tenminste 25 min.

Target Screening:

Een mengsel van componenten wordt aangeleverd ten behoeve van target screening (TS), waarmee retentietijden en massaspectra kunnen worden vastgelegd in een bibliotheek.

Een nauwkeurige en transparante rapportage van de resultaten uit de target screening wordt als essentieel beschouwd. Het wordt dan ook sterk aangemoedigd om een zo betrouwbaar mogelijke weergave van de aangetroffen targets in de monsters te presenteren. Aqualysis streeft ernaar om voor alle gedetecteerde componenten een betrouwbaarheidsniveau 1 te behalen volgens de richtlijn NTA 8033:2021. Dit houdt in:

- Accurate massa precursor-ion: < 2 mDa of < 5 ppm.
- Retentietijd: Afwijking van referentie ≤ 2.5%.
- Fragmentatie spectrum: komt overeen met de referentie, massa afwijking fragmenten < 2 mDa of < 5 ppm.

Wanneer beschikbaar kan voor de nauwkeurigheid additionele informatie zoals het fijn isotopenpatroon of CCS-waarden worden toegevoegd.

Componenten voor Target Screening:

Component Naam	Molecuulformule
Trifluralin	C13H16F3N3O4
Isoproturon	C12H18N2O
Atrazine	C8H14ClN5
Alachlor	C14H20ClNO2
Quinoxifen	C15H8Cl2FNO
Iopromide	C18H24I3N3O8
Benzotriazol	C6H5N3
O-desmethylvenlafaxine	C16H25NO2

heeft opmaak toegepast: Tekstkleur: Rood, Doorhalen

heeft opmaak toegepast: Tekstkleur: Rood, Doorhalen

Suspect Screening:

Suspect Screening wordt uitgevoerd op basis van een vooraf opgestelde lijst van suspects, zoals opgenomen in de componententabel voor suspect screening. Deze tabel bevat 200 suspects, inclusief CAS-nummer en molecuulformule, afkomstig uit de categorieën bestrijdingsmiddelen, medicijnresten, en forensische stoffen. Net als bij Target Screening is vooraf bepaald naar welke suspects wordt gezocht. Ook hier is de nauwkeurigheid van de rapportage van groot belang, waarbij de suspects worden geverifieerd aan de hand van een bibliotheek met fragmenten (PvE-eis 39).

Aqualysis streeft ernaar om voor alle gedetecteerde suspect componenten een betrouwbaarheidsniveau 2b te behalen conform de richtlijn NTA 8033:2021. Dit betekent dat wordt voldaan aan de volgende criteria:

- Accurate massa precursor-ion: < 2 mDa of < 5 ppm.
- Fragmentatie spectrum: komt overeen met de bibliotheekreferentie, massa afwijking fragmenten < 2 mDa of < 5 ppm.

Wanneer beschikbaar kan voor de nauwkeurigheid additionele informatie zoals het fijn isotopenpatroon of CCS-waarden worden toegevoegd.

Componenten voor Suspect Screening:

Component naam	CAS Nummer	Molecuulformule
2,6-Dichlorobenzamide	2008-58-4	C7H5Cl2NO
4-Methybenzotriazole	29878-31-7	C7H7N3
5-Methybenzotriazole	136-85-6	C7H7N3
Acetamiprid	135410-20-7	C10H11ClN4
Acibenzolar-S-methyl	135158-54-2	C8H6N2OS2
Aclonifen	74070-46-5	C12H9ClN2O3
Alachlor	15972-60-8	C14H20ClNO2
Aldicarb	116-06-3	C7H14N2O2S
Allethrin	584-79-2	C19H26O3
Ametryn	834-12-8	C9H17N5S
Amisulpride	53583-79-2	C17H27N3O4S
Atrazine	1912-24-9	C8H14ClN5

Atrazine desethyl	6190-65-4	C6H10ClN5
Azinphos ethyl	2642-71-9	C12H16N3O3PS2
Azinphos methyl	86-50-0	C10H12N3O3PS2
Azithromycin	83905-01-5	C38H72N2O12
Benfluralin	1861-40-1	C13H16F3N3O4
Benzotriazole	95-14-7	C6H5N3
Benzovindiflupyr	1072957-71-1	C18H15Cl2F2N3O
Bifenazate	149877-41-8	C17H20N2O3
Bifenox	42576-02-3	C14H9Cl2NO5
Bifenthrin	82657-04-3	C23H22ClF3O2
Bixafen	581809-46-3	C18H12Cl2F3N3O
Boscalid	188425-85-6	C18H12Cl2N2O
Bromopropylate	18181-80-1	C17H16Br2O3
Bromoxynil octanoate	1689-99-2	C15H17Br2NO2
Bromuconazol	116255-48-2	C13H12BrCl2N3O
Bupirimate	41483-43-6	C13H24N4O3S
Butachlor	23184-66-9	C17H26ClNO2
Butocarboxim sulfoxide	34681-24-8	C7H14N2O3S
Candesartan	139481-59-7	C24H20N6O3
Carbamazepine	298-46-4	C15H12N2O
Carbaryl	63-25-2	C12H11NO2
Carfentrazone-ethyl	128639-02-1	C15H14Cl2F3N3O3
Chlorfenvinphos	470-90-6	C12H14Cl3O4P
Chlorothalonil	1897-45-6	C8Cl4N2
Chloroxuron	1982-47-4	C15H15ClN2O2
Chlorpropham	101-21-3	C10H12ClNO2
Chlorpyrifos	2921-88-2	C9H11Cl3NO3PS
Chlorpyrifos-methyl	5598-13-0	C7H7Cl3NO3PS
cis-1,2,3,6-Tetrahydrophthalimide	1469-48-3	C8H9NO2
Citalopram	59729-33-8	C20H21FN2O
Clarithromycin	81103-11-9	C38H69NO13
Clodinafop-propargyl	105512-06-9	C17H13ClFNO4
Cloquintocet-mexyl	99607-70-2	C18H22ClNO3
Codeine	76-57-3	C18H21NO3
Coumaphos	56-72-4	C14H16ClO5PS
Cyanazine	21725-46-2	C9H13ClN6
Cybutryne	28159-98-0	C11H19N5S
Cycloate	1134-23-2	C11H21NOS
Cyflufenamide	180409-60-3	C20H17F5N2O2
Cyfluthrin	68359-37-5	C22H18Cl2FNO3
Cypermethrin	52315-07-8	C22H19Cl2NO3
Cyprodinil	121552-61-2	C14H15N3
Deltamethrin	52918-63-5	C22H19Br2NO3
Demeton (mixed isomers)	8065-48-3	C8H19O3PS

Demeton-S-methyl	919-86-8	C6H15O3PS2
Desmetryn	1014-69-3	C8H15N5S
Diazinon	333-41-5	C12H21N2O3PS
Dichlobenil	1194-65-6	C7H3Cl2N
Dichlorvos	62-73-7	C4H7Cl2O4P
Diclofenac	15307-86-5	C14H11Cl2NO2
Dicofol	115-32-2	C14H9Cl5O
Difenoconazole	119446-68-3	C19H17Cl2N3O3
Diflubenzuron	35367-38-5	C14H9ClF2N2O2
Dimethachlor	50563-36-5	C13H18ClNO2
Dimethoate	60-51-5	C5H12NO3PS2
Dimethomorph	110488-70-5	C21H22ClNO4
Disulfoton	298-04-4	C8H19O2PS3
Dodemorph	1593-77-7	C18H35NO
Dyfonate	944-22-9	C10H15OPS2
Esfenvalerate	66230-04-4	C25H22ClNO3
Ethofumesate	26225-79-6	C13H18O5S
Ethoprophos	13154-48-4	C8H19O2PS2
Etofenprox	80844-07-1	C25H28O3
Etoxazole	153233-91-1	C21H23F2NO2
Etridiazole	2593-15-9	C5H5Cl3N2OS
Fenamidone	161326-34-7	C17H17N3OS
Fenamiphos	22224-92-6	C13H22NO3PS
Fenarimol	60168-88-9	C17H12Cl2N2O
Fenitrothion	122-14-5	C9H12NO5PS
Fenoxaprop-p-ethyl	71283-80-2	C18H16ClNO5
Fenoxycarb	72490-01-8	C17H19NO4
Fenpropathrin	39515-41-8	C22H23NO3
Fenpropimorph	67564-91-4	C20H33NO
Fenthion	55-38-9	C10H15O3PS2
Florasulam	145701-23-1	C12H8F3N5O3S
Fluazifop-p-butyl	79241-46-6	C19H20F3NO4
Flufenacet	142459-58-3	C14H13F4N3O2S
Flumioxazin	103361-09-7	C19H15FN2O4
Fluopicolide	239110-15-7	C14H8Cl3F3N2O
Fluopyram	658066-35-4	C16H11ClF6N2O
Flupyradifurone	951659-40-8	C12H11ClF2N2O2
Fluroxypyr-1-methylheptyl ester	81406-37-3	C15H21Cl2FN2O3
Fluxapyroxad	907204-31-3	C18H12F5N3O
Fosthiazate	98886-44-3	C9H18NO3PS2
Furalaxyl	57646-30-7	C17H19NO4
Furosemide	54-31-9	C12H11ClN2O5S
Gabapentin	60142-96-3	C9H17NO2
Haloxypop-p-methyl	72619-32-0	C16H13ClF3NO4

Heptachlor	76-44-8	C10H5Cl7
Heptenophos	23560-59-0	C9H12ClO4P
Hydrochlorothiazide	58-93-5	C7H8ClN3O4S2
Indoxacarb	173584-44-6	C22H17ClF3N3O7
Iopromide	73334-07-3	C18H24I3N3O8
Irbesartan	138402-11-6	C25H28N6O
Isoproturon	34123-59-6	C12H18N2O
Isoprazam	881685-58-1	C20H23F2N3O
Isoxadifen-ethyl	163520-33-0	C18H17NO3
Kresoxim-methyl	143390-89-0	C18H19NO4
L-Cyhalothrin	91465-08-6	C23H19ClF3NO3
Lenacil	2164-08-1	C13H18N2O2
Linuron	330-55-2	C9H10Cl2N2O2
Malathion	121-75-5	C10H19O6PS2
Mandestrobin	173662-97-0	C19H23NO3
Mepaniprim	110235-47-7	C14H13N3
Metalaxyl-M	70630-17-0	C15H21NO4
Metamitron	41394-05-2	C10H10N4O
Metazachlor	67129-08-2	C14H16ClN3O
Metconazole	125116-23-6	C17H22ClN3O
Methabenzthiazuron	18691-97-9	C10H11N3OS
Methamphetamine	537-46-2	C10H15N
Methidathion	950-37-8	C6H11N2O4PS3
Metolachlor	87392-12-9	C15H22ClNO2
Metoprolol	37350-58-6	C15H25NO3
Metoxuron	19937-59-8	C10H13ClN2O2
Metrafenone	220899-03-6	C19H21BrO5
Metribuzin	21087-64-9	C8H14N4OS
Metsulfuron-methyl	74223-64-6	C14H15N5O6S
Mevinphos	7786-34-7	C7H13O6P
Monolinuron	1746-81-2	C9H11ClN2O2
N, N-Diethyl-m-toluamide	134-62-3	C12H17NO
N,N-Dimethyl-N'-p-tolylsulphamide	66840-71-9	C9H14N2O2S
Napropamide	15299-99-7	C17H21NO2
O-desmethylvenlafaxine	93413-62-8	C16H25NO2
Oxadiazon	19666-30-9	C15H18Cl2N2O3
Oxathiapiprolin	1003318-67-9	C24H22F5N5O2S
Oxazepam	604-75-1	C15H11ClN2O2
Oxydemeton-methyl	301-12-2	C6H15O4PS2
Paclobutrazol	76738-62-0	C15H20ClN3O
Parathion	56-38-2	C10H14NO5PS
Parathion-methyl	298-00-0	C8H10NO5PS
Penconazole	66246-88-6	C13H15Cl2N3
Pendimethalin	40487-42-1	C13H19N3O4

Penflufen	494793-67-8	C18H24FN3O
Permethrin	52645-53-1	C21H20Cl2O3
Phthalimide	85-41-6	C8H5NO2
Picolinafen	137641-05-5	C19H12F4N2O2
Picoxystrobin	117428-22-5	C18H16F3NO4
Pirimiphos-methyl	29232-93-7	C11H20N3O3PS
Procymidone	32809-16-8	C13H11Cl2NO2
Prometryne	7287-19-6	C10H19N5S
Pronamide	23950-58-5	C12H11Cl2NO
Propachlor	1918-16-7	C11H14ClNO
Propaquizafop	111479-05-1	C22H22ClN3O5
Propazine	139-40-2	C9H16N5Cl
Propham	122-42-9	C10H13NO2
Propiconazole	60207-90-1	C15H17Cl2N3O2
Propoxur	114-26-1	C11H15NO3
Propranolol	525-66-6	C16H21NO2
Prosulfocarb	52888-80-9	C14H21NOS
Prosulfuron	94125-34-5	C15H16F3N5O4S
Pymetrozine	123312-89-0	C10H11N5O
Pyraflufen-ethyl	129630-19-9	C15H13Cl2F3N2O4
Pyrazon	1698-60-8	C10H8ClN3O
Pyrazophos	13457-18-6	C14H20N3O5PS
Pyridaben	96489-71-3	C19H25ClN2OS
Pyridalyl	179101-81-6	C18H14Cl4F3NO3
Pyrifenox	88283-41-4	C14H12Cl2N2O
Pyrimethanil	53112-28-0	C12H13N3
Pyriofenone	688046-61-9	C18H20ClNO5
Pyriproxyfen	95737-68-1	C20H19NO3
Quinoclamine	2797-51-5	C10H6ClNO2
Quinoxifen	124495-18-7	C15H8Cl2FNO
Quizalofop-p-ethyl	100646-51-3	C19H17ClN2O4
Simazine	122-34-9	C7H12ClN5
Sotalol	3930-20-9	C12H20N2O3S
Spinetoram	935545-74-7	C42H69NO10
Spiroxamine	118134-30-8	C18H35NO2
Sulfamethoxazole	723-46-6	C10H11N3O3S
Sulfoxaflor	946578-00-3	C10H10F3N3OS
Tebuconazol	107534-96-3	C16H22ClN3O
Tefluthrin	79538-32-2	C17H14ClF7O2
Terbuthylazine	5915-41-3	C9H16ClN5
Terbuthylazine desethyl	30125-63-4	C7H12ClN5
Terbutryn	886-50-0	C10H19N5S
Tetrachlorvinphos	22248-79-9	C10H9Cl4O4P
Tetramethrin	7696-12-0	C19H25NO4

Tolclofos-methyl	57018-04-9	C9H11Cl2O3PS
Triadimefon	43121-43-3	C14H16ClN3O2
Triallate	2303-17-5	C10H16Cl3NOS
Triazophos	24017-47-8	C12H16N3O3PS
Trifloxystrobin	141517-21-7	C20H19F3N2O4
Triflumizole	68694-11-1	C15H15ClF3N3O
Trifluralin	1582-09-8	C13H16F3N3O4
Trimethoprim	738-70-5	C14H18N4O3
Triticonazole	131983-72-7	C17H20ClN3O
Valifenalate	283159-90-0	C19H27ClN2O5
Venlafaxine	93413-69-5	C17H27NO2
Vinclozolin	50471-44-8	C12H9Cl2NO3

Non-Target Screening:

De analyse voor non-target screening bestaat uit een niet-gespikete referentie en een gespiked watermonster. De toegevoegde componenten behoren tot de categorieën bestrijdingsmiddelen, geneesmiddelen, forensische stoffen, en antibiotica. In totaal worden maximaal 50 componenten toegevoegd, wat kan resulteren in de detectie van deze 50 stoffen, aangevuld met enkele adducten en in-source fragmenten. Een rapportage waarin, na aftrek van de referentie, meer dan 500 features worden gerapporteerd, wordt echter niet als positief beoordeeld. Dit wijst op onvoldoende specificiteit of een gebrek aan effectieve filtering binnen de analysemethode/processing.

Componentgroepen voor Non-Target Screening:

Bestrijdingsmiddelen, Geneesmiddelen, Forensische stoffen, en Antibiotica.

Injectievolgorde Target-, Suspect-, en Non-Target Screening (Verplicht):

Injectie	Oplossing	Processing methode
1	Mix Referentiestandaarden TS	Target & Suspect Screening
2	Sample 1	Target & Suspect Screening
3	Sample 2	Target & Suspect Screening
4	Sample 3	Target & Suspect Screening
5	Sample 4	Target & Suspect Screening
6	Sample 5	Target & Suspect Screening
7	Sample 6	Target & Suspect Screening
8	Sample 7	Target & Suspect Screening
9	Sample 8	Target & Suspect Screening
10	Sample 9	Target & Suspect Screening
11	Sample 10	Target & Suspect Screening
12	Sample 11	Target & Suspect Screening
13	Sample 12	Target & Suspect Screening
14	Sample 13	Target & Suspect Screening
15	Sample 14	Target & Suspect Screening
16	Sample 15	Target & Suspect Screening
17	Milli-Q	Non-target Screening
18	NTS Referentie (zonder spike)	Non-target Screening
19	NTS Sample (gespiked)	Non-target Screening
20*	NTS Sample (gespiked)	Optionele Injectie voor Identificatie Strategie*

**Injectie 20 mag worden uitgevoerd met een alternatieve MS-methode om, indien nodig, extra informatie op te nemen voor de volledigheid van de Identificatie Strategie. Deze injectie hoeft niet in deze batch en mag op een ander moment, na de batch, worden uitgevoerd.*

Rapportage target- en suspect screening bevat tenminste:

- Beschrijving van de toegepaste analysemethode op maximaal 2 A4.
- Gegevens van uitsluitend de gevonden target- en suspectcomponenten per sample, aangeleverd in minimaal een Excel-bestand, waarbij:
 - Elke waarde in een aparte kolom staat.
 - De kolommen bevatten headers.
 - Elke component is weergegeven in een enkele rij.
 - Alle monsters staan in hetzelfde tabblad.
 - Datum en tijdstip van alle injecties.
 - Componenten die niet zijn aangetroffen niet worden gerapporteerd.
 - Per gevonden component tenminste:
 - Piekoppervlakte.
 - Precursor massa (m/z).
 - Precursor massa afwijking (ppm).
 - De twee fragmentmassa's met de hoogste intensiteit (m/z).
 - Retentietijden (minuten).
 - Voor targets de retentietijdafwijking (%).
 - Bibliotheek match.
 - Betrouwbaarheid van bibliotheekmatch.

- Eventuele beschikbare informatie zoals, match op isotopenpatroon of CCS-waarden (indien beschikbaar).
- Voor sample 12 aanvullend:
 - Afbeeldingen van alle gevonden target- en suspectcomponentpieken.
 - Afbeeldingen van MS- en MS/MS-spectra van de componenten en de MS/MS bibliotheekreferenties, inclusief betrouwbaarheid van de match.

Rapportage non-target screening bevat tenminste:

- Beschrijving van de toegepaste analysemethode op maximaal 2 A4 (dit is zelfde methode als target- en suspect screening).
- Overzicht gevonden componenten (tenminste beschikbaar via Excel) ten opzichte van referentie sample, inclusief:
 - Precursor massa (m/z).
 - Informatie betreft adduct, zoals $[M+H]^+$, $[M+Na]^+$, *etc.*
 - Informatie betreft in-source fragment.
 - Retentietijden (minuten).
 - Piekoppervlakten.
 - Potentiële molecuulformule.
 - Potentiële bibliotheek match op MS/MS (inclusief betrouwbaarheid).
 - Additionele beschikbare informatie zoals bijvoorbeeld, match op isotopenpatroon, CCS-waarden.
- Datum en tijd injecties.

Grootte totale datafile van acquisitie (alle 19 injecties target-, suspect-, en non-target screening samen. De optionele injectie -20- voor identificatiestrategie is hier geen onderdeel van).