

Sleutelfactor Toxiciteit



Invloed van PFAS op de berekende zuiveringsopgave- inspanning voor drinkwater Hebben PFAS een relatief grote bijdrage?

Auteur:

Tessa Pronk (KWR Water Research Institute)

Data levering:

RIWA-Rijn (meetgegevens Rijn)

RIWA-Maas (meetgegevens Maas)

Versie: oktober 2021

1. Inleiding

PFAS zijn stoffen die erg persistent en toxisch kunnen zijn. Daarom liggen deze stoffen op dit moment onder een vergrootglas. In deze notitie gaan we in op de invloed van PFAS op de zuiveringsinspanning en de zuiveringsopgave voor drinkwater (Pronk et al. 2021). De zuiveringsopgave is gedefinieerd al het percentage er gezuiverd moet worden om op een doelconcentratie in drinkwater uit te komen. De zuiveringsinspanning gaat over hoeveel moeite dit kost.

Deze notitie beschrijft in de vorm van een case studie hoe dit in de praktijk voor PFAS werkt en of hier verbeteringen uit te halen zijn voor de interpretatie of berekening van de zuiveringsopgave of zuiveringsinspanning voor drinkwater. We valideren de eerder ontwikkelde de vuistregels voor zuivering (zie notitie 'zuiveringsopgave-inspanning') specifiek voor PFAS, en kijken of deze redelijkerwijs geldig zijn voor het bepalen van de zuiveringsinspanning van deze groep stoffen. Daarna kijken we met behulp van meetgegevens of er in de praktijk een zuiveringsopgave bestaat voor PFAS in meetlocaties aan de Rijn en de Maas.



2. Methode en gehanteerde normen PFAS

We beschouwen PFAS uit twee verschillende lijsten. Op de lijst met PFAS van het RIVM (2019) staan eenenvijftig PFAS stoffen die onder de zeer zorgwekkende stoffen vallen (zie Bijlage Tabel A). In de vernieuwde EU Richtlijn (2020) staan een twintigtal PFAS (Tabel 1). Dit zijn per- en polyfluoralkylstoffen die risicovol worden geacht in verband met voor menselijke consumptie bestemd water (EU richtlijn, 2020). We voegen deze twee lijsten samen tot één lijst met in totaal 53 PFAS.

Voor de PFAS hebben we via open source statistische software ‘R’ de eigenschappen gedownload die in de vuistregels (zie notitie ‘zuiveringsopgave-inspanning’) voor het bepalen van de zuiveringsinspanning zijn beschreven. Het gaat om de eigenschappen logKow, logKoa, average mass, featureringcount3D en abonds. Vervolgens bekijken we de berekende zuivering per stof, per techniek, met deze vuistregels. Vervolgens valideren we de berekeningen voor de stoffen waar zuivering efficiëntie gegevens voorhanden zijn.

Met behulp van gemeten concentraties van PFAS in de Rijn en Maas kijken we of deze stoffen als groep de waterkwaliteit mede bepalen (‘zuiveringsopgave-inspanning’). In Figuur 1 staan de stappen in een overzicht weergegeven.



Figuur 1. De stappen om tot een uitspraak over druk van PFAS op de zuiveringsopgave-inspanning te komen.

Voorheen vielen de PFAS onder de ‘overig antropogeen’ en was de drinkwatersignaleringswaarde 1 µg/l. Inmiddels is deze waarde flink aangescherpt. In de vernieuwde EU Richtlijn, 2020, staan een twintigtal PFAS die als som niet boven de 0,1 µg/l mogen komen (Tabel 1). Naast de som 20 PFAS wordt door de Europese Autoriteit voor voedselveiligheid (EFSA) ook gesproken over een som 4 PFAS. In 2020 is door EFSA een advies uitgebracht over de gezondheidkundige risicogrens van de som van vier PFAS, uitgedrukt als een toelaatbare wekelijkse inname (TWI) (EFSA, 2020).

Niet alle PFAS zijn even schadelijk. Het is logisch om dit in de som PFAS te laten meewegen. Om de som PFAS te bepalen, rekenen we deze ook om naar PFOA equivalenten. Dit doen we met behulp van de ‘relative potency factor’ (RPF) en deze zijn voor een aantal PFAS vastgesteld door het RIVM (2019) (Tabel 1).



Tabel 1. De 20 PFAS genoemd in de EU richtlijn (2020) voor som 20PFAS, met 'relative potency factor' (RIVM, 2019). De 4 PFAS genoemd door EFSA zijn aangegeven met * bij hun afkorting. Bij RPF waarde '-' is geen getal beschikbaar.

CAS nummer	DW Richtlijn 'SOM van PFAS 0.1'	Afkorting	RPF
375-22-4	Perfluorbutaanzuur	PFBA	0.05
375-73-5	Perfluorbutaansulfonzuur	PFBS	0.001
335-76-2	Perfluordecaanzuur	PFDA	4-10
79780-39-5	Perfluordodecaansulfonzuur	PFDoAS	-
307-55-1	Perfluordodecaanzuur	PFDoDA	3
335-77-3	Perfluordecaansulfonzuur	PFDS	2
375-85-9	Perfluorheptaanzuur	PFHpA	0.1-1
375-92-8	Perfluorheptaansulfonzuur	PFHpS	0.6-2
307-24-4	Perfluorhexaanzuur	PFHxA	0.01
355-46-4	Perfluorhexaansulfonzuur	PFHxS*	0.6
375-95-1	Perfluornonaanzuur	PFNA*	10
474511-07-4	Perfluornonaansulfonzuur	PFNS	-
335-67-1	Perfluoroctaanzuur	PFOA*	1
1763-23-1	Perfluoroctaansulfonzuur	PFOS*	2
2706-90-3	Perfluorpentaanzuur	PFPeA	0.1-0.05
2706-91-4	Perfluorpentaansulfonzuur	PFPeS	0.001-0.6
791563-89-8	Perfluortridecaansulfonzuur	PFTDAS	-
72629-94-8	Perfluortridecaanzuur	PFTTrDA	0.3-3
749786-16-1	Perfluorundecaansulfonzuur	PFUdAS	-
2058-94-8	Perfluorundecaanzuur	PFUnDA	4

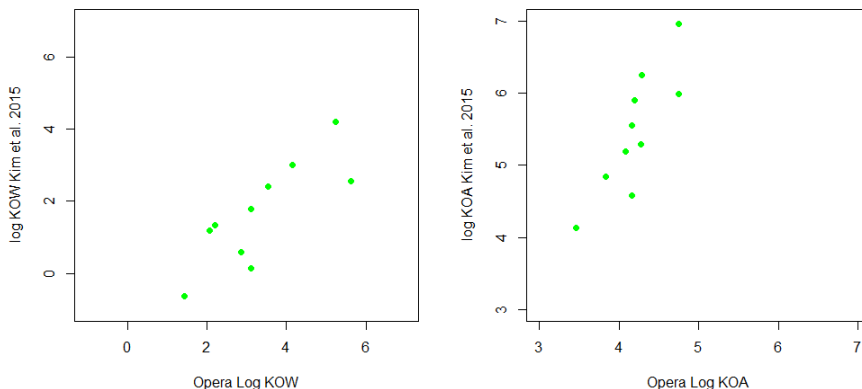
3. Zuiveringsinspanning: vuistregels toepassen op PFAS

In Tabel A in Bijlage I staan de stoffeigenschappen en de berekende zuiveringsefficiënties voor de PFAS met de vuistregels die zijn opgesteld in de KIWK toxicologie Notitie 'Vuistregels Zuiveringsopgave-inspanning'.

PFAS robuustheid voorspelde eigenschappen

Over het algemeen is er overeenstemming tussen verschillende voorspellingsmodellen voor logKow ('logP') (zie Figuur 2) voor de stoffen uit 20 PFAS. Voor logKoa valt het model van Kim et al. (2015) hoger uit dan de voorspelling van Opera, maar de verhouding tussen de stoffen komt overeen. De vuistregel kan gebruikt worden, mits met de voorspelde logKoa van Opera. Er is geen aanwijzing dat de voorspelde eigenschappen logKoa en logKow voor PFAS minder accuraat zijn, en we kunnen deze dus gebruiken. In de Bijlage I, Tabel B staat nog een vergelijking van experimentele logKow ten opzichte van de voorspelde logKow. Deze komen ook overeen.



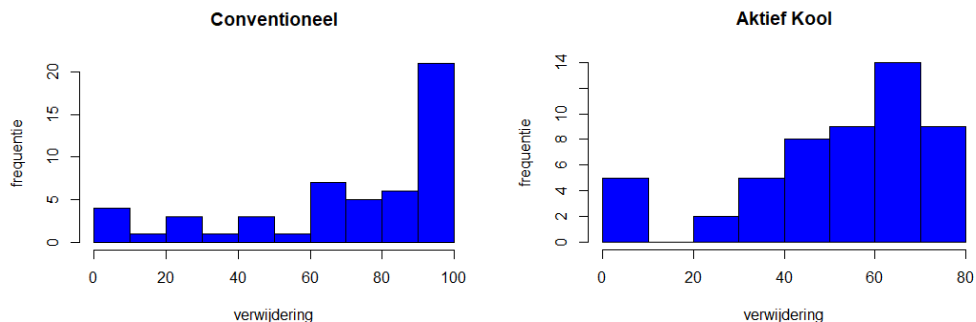


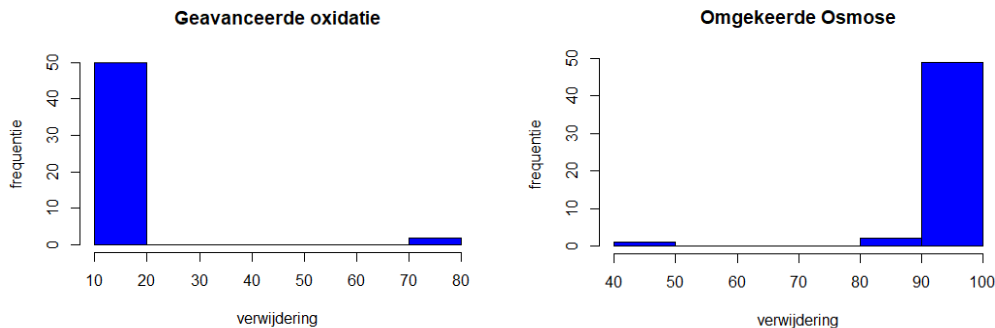
Figuur 2. Correlatie tussen voorspelde waarden van verschillende modellen voor stoffeigenschappen logKow en logKoa.

Voor twee van de PFAS zijn er featureringcount3D en aromatische bindingen geteld (Bijlage I, Tabel A). Bij controle is dit niet correct. Deze twee PFAS hebben geen ringstructuur. Waarom deze twee foutief zijn voorspeld, is onbekend. We zullen aangeven in de rest van deze notitie waar dit tot foutieve berekende zuiveringsefficiënties leidt. De massa van het molecuul is niet foutgevoelig, daarom is deze niet gecontroleerd.

PFAS verificatie van berekende zuivering

In Figuur 3 is de verdeling van berekende zuivering aan de hand van de vuistregels over de 53 PFAS uit de ZZS en de EU Richtlijn lijsten weergegeven. Er is een grote spreiding in de berekende mate van zuivering door conventioneel (coagulatie/flocculatie) en actief kool technieken; poederkool (PAC) en granulair kool (GAC). De meeste PFAS hebben een berekende redelijke zuivering bij deze twee technieken. Voor geavanceerde oxidatie wordt het overgrote deel van de PFAS slecht gezuiverd volgens de berekeningen. Voor RO is dit andersom, het overgrote deel van de PFAS wordt goed gezuiverd volgens de berekening.





Figuur 3 a-d. De spreiding van de berekende zuivering van PFAS per techniek. Oxidatie is niet getoond, maar volgt hetzelfde beeld als geavanceerde oxidatie. De stoffen die volgens de berekening hoog worden gezuiverd met geavanceerde oxidatie, zijn foutief berekend door een foutieve voorspelling van ringstructuren.

In [van der Aa et al. \(2017\)](#) staan zuiveringsefficiënties in verschillende zuiveringsstappen. In dat rapport wordt bevestigd dat RO een goede zuivering van PFAS bewerkstelligd (80-100%). PAC geeft een lage verwijdering (0-40%). Voor (geavanceerde) oxidatie zijn geen gegevens. Voor GAC ook niet, en ook de conventionele zuivering heeft geen gegevens. In [Kim et al. \(2020\)](#) gaf GAC een verwijdering van 0-40%, met meer verwijdering voor PFAS met lange ketens (tot 80%). Er wordt ook negatieve verwijdering gemeten, wat duidt op verdringing van geadsorbeerde PFAS door andere stoffen. Oxidatie met ozon gaf een lage verwijdering (rond de 0%). RO en conventionele zuivering werden hier niet onderzocht.

De zuivering door actief kool wordt gemiddeld mogelijk iets te hoog ingeschat door de vuistregels. De lage werkelijk zuivering is mogelijk veroorzaakt door verdringing van PFAS door andere stoffen, wat in de vuistregel niet specifiek word meegenomen. Voor RO lijkt de berekening voldoende te kloppen.

Voor de conventionele zuivering is een extra, aparte dataset van één van de bedrijven verkregen. Hieruit blijkt dat de conventionele zuivering voor dit bedrijf veel lager is dan de berekende zuiveringsefficiëntie aan de hand van de vuistregels. Er is in veel gevallen een negatieve zuivering gemeten. Dit duidt erop dat de PFAS in een conventionele zuivering niet permanent gebonden worden en loskomen.

De vuistregel voor de conventionele zuivering, op basis van logKow, moeten we voor PFAS verwerpen op basis van deze gemeten data. Er zijn te weinig datapunten om vast te kunnen stellen of er toch een correlatie is tussen de gemeten waarden en de berekende waarden van de conventionele zuivering voor PFAS. De absolute hoogte van de gemeten en berekende zuivering komt in ieder geval niet overeen voor conventionele zuivering.

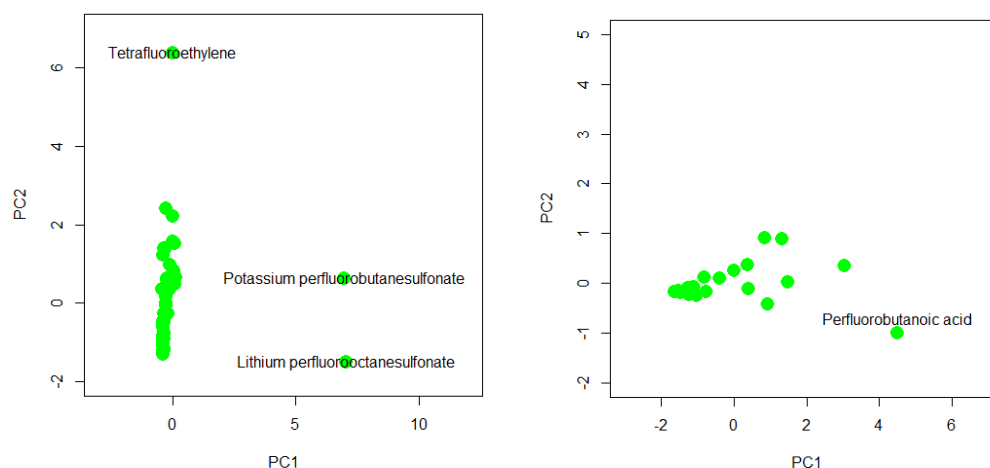
In conclusie, hoeven we de vuistregels voor RO en oxidatie met deze resultaten niet te verwerpen voor PFAS. Ook actieve kool komt redelijk overeen. In andere woorden, er is geen reden om de vuistregels af te keuren op basis van deze validatie met meetgegevens. Voor de



conventionele zuivering zijn de vuistregels niet redelijk, de werkelijke zuiveringsefficiënties bij het drinkwaterbedrijf waar data voorhanden is, zijn veel lager.

Verschillen zuiveringsinspanning van individuele PFAS

In Figuur 6 staat de variabiliteit van de berekende PFAS zuivering op basis van vuistregels weergegeven in een PCA plot. We gebruiken hier ook de afgekeurde vuistregel voor de conventionele zuivering, deze is dus niet accuraat. De stoffen zijn gegroepeerd op de mate van berekende zuivering aan de hand van de vuistregels. De meeste PFAS hebben volgens de vuistregels ongeveer dezelfde zuivering. Punten verder weg van de gegroepeerde punten hebben een afwijkende berekende zuivering. Deze zijn met naam weergegeven in de plot.



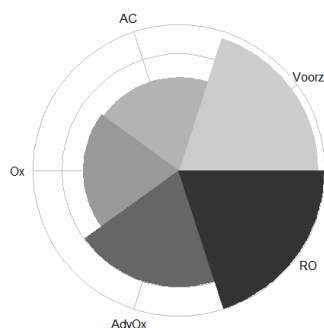
Figuur 6. PCA plot van de PFAS uit de ZZS en 20 PFAS lijsten (links) en alleen som 20 PFAS (rechts). Voor 20 PFAS (plot rechts) is (geavanceerde) oxidatie buiten beschouwing gelaten, omdat deze eigenschap niet varieerde. Voor Lithium perfluorooctanesulfonate en Potassium perfluorobutanesulfonate (plot links) is de voorspelling van eigenschappen die bepalend zijn voor oxidatie niet goed. Vandaar dat de zuivering efficiëntie voor (geavanceerde) oxidatie niet klopt. Dat is de reden dat ze afwijkend zijn. De plots zullen opnieuw gemaakt moeten worden met een nieuwe vuistregel voor conventionele zuivering, speciaal afgeleid voor PFAS, in deze notitie.

De PFAS hebben volgens de vuistregels variatie in hoe goed ze door alle technieken gezamenlijk verwijderd zouden kunnen worden. De laagste berekende zuivering voor alle 53 PFAS uit de ZZS lijst en de EU richtlijn is voor Tetrafluoroethylene (Figuur 6 plot links), die vanwege de kleine massa zelfs in RO niet goed gezuiverd wordt (zie Bijlage I Tabel A). Maar, deze PFAS zullen we niet in water terugvinden. Geschat zo'n 98% blijft in de lucht (ECHA). Lithium perfluorooctanesulfonate en Potassium perfluorobutanesulfonate (Figuur 6 plot links) wijken af vanwege hun relatief hoge verwijdering in (geavanceerde) oxidatie. Dit ligt aan een fout in de voorspelling van de eigenschappen (abonds en 3Dfeatureringcount). In werkelijkheid hebben deze stoffen geen ringen, maar deze worden wel voorspeld.

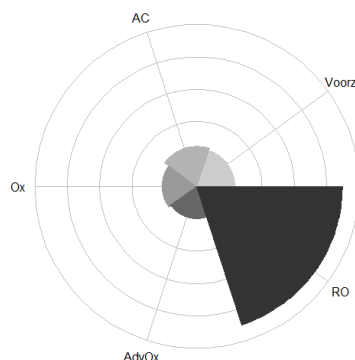


Voor de 20 PFAS uit de EU richtlijn (Figuur 6 plot rechts) heeft Perfluorobutanoic acid een berekende slechte verwijdering door alle technieken behalve RO. In Figuur 7 zijn de berekende zuiveringsefficiënties weergegeven voor twee van de relatief afwijkende stoffen.

Lithium perfluorooctanesulfonate



Perfluorobutanoic acid



Figuur 7. Variabiliteit tussen enkele PFAS stoffen in verwijdering volgens de vuistregels. Voor Lithium perfluorooctanesulfonate is de voorspelling van eigenschappen die bepalend zijn voor oxidatie niet goed. Vandaar dat de zuivering efficiëntie voor (geavanceerde) oxidatie voor deze stof niet klopt. Voor beide stoffen geldt dat de vuistregel voor conventionele zuivering niet geldt voor PFAS, en dus niet correct is. 'Ox' is oxidatie, 'AdvOx' is geavanceerde oxidatie, 'RO' is omgekeerde osmose, 'AC' is actieve kool, 'Voorz' is conventionele zuivering.

4. PFAS zuiveringsopgave

De EU Richtlijn stelt een somwaarde voor van 20 PFAS die drinkwaterrelevant zijn. We berekenen de som van deze PFAS voor meetdata van de locaties van RIWA Rijn en RIWA Maas. De PFAS die worden gemeten verschilt tussen locatie en jaar. Voor de PFAS concentratie waarden nemen we het maximum dat in een jaar is gemeten op een locatie. Ook berekenen we de som in PFOA equivalenten met behulp van de RPF waarden in Tabel 1. Als een subset van de som 20 PFAS in PFOA equivalenten berekenen we ook de som 4 PFAS. De som 4 PFAS bestaat uit PFOA, PFOS, PFNA, PFHxS.

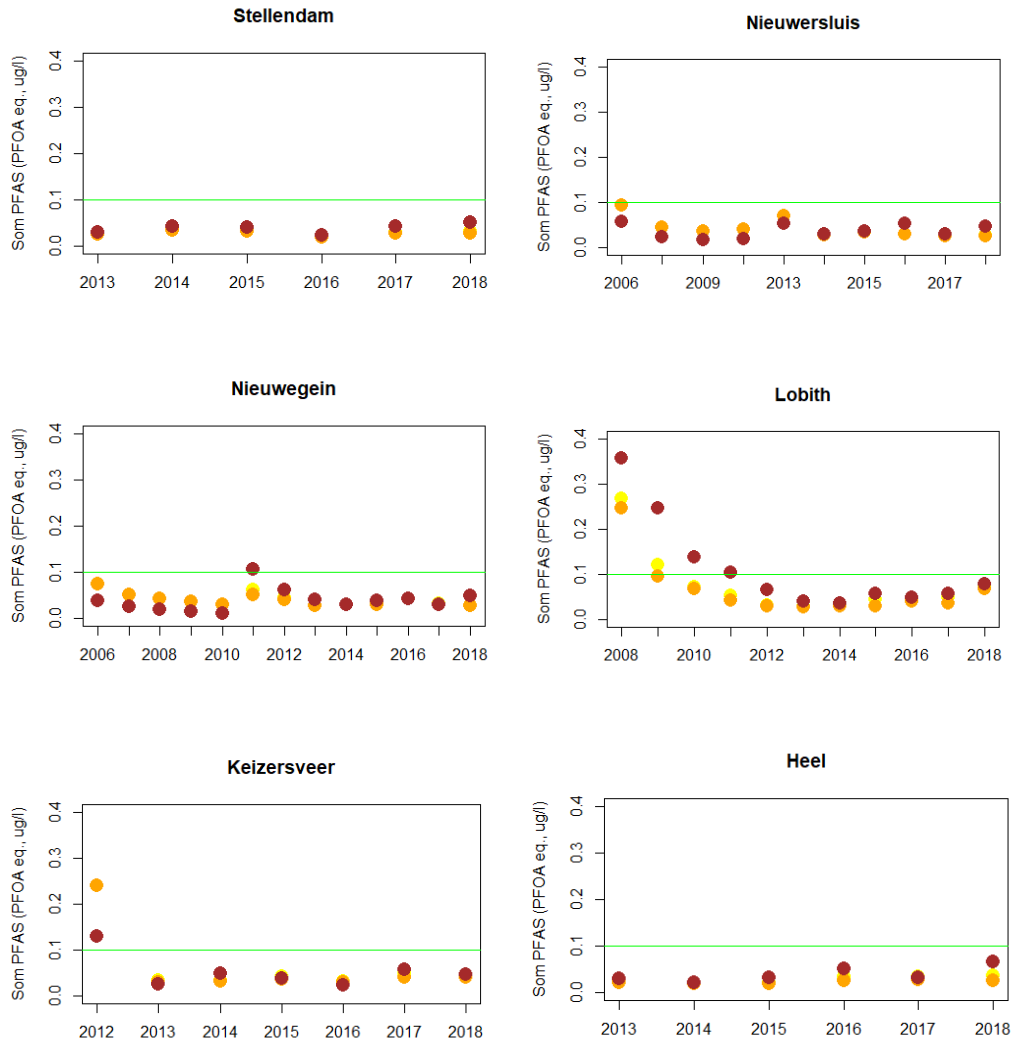
De som 20 PFAS is simpelweg alle concentraties opgeteld. Een rekenvoorbeeld voor de som 4 PFAS in PFOA equivalenten, waarbij voor PFOS 1.1 ng/l, PFOA 4.4 ng/l, PFNA 0,5 ng/l en PFHxS 0.73 ng/l is gemeten en gebruikt is gemaakt van de RPF uit Tabel 1:

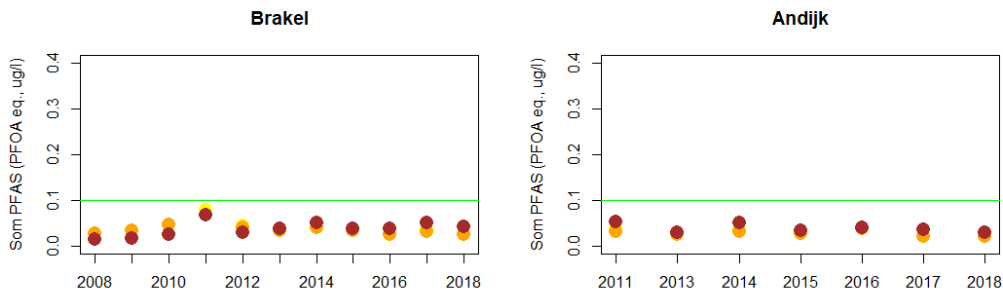
$$1.1 \text{ ng PFOS} / \text{L} \times 2 + 4.4 \text{ ng PFOA} / \text{L} \times 1 + 0.5 \text{ ng PFNA} / \text{L} \times 10 + 0.73 \text{ ng PFHxS} / \text{L} \times 0.6 = 12 \text{ ng PFOA equivalenten/L}$$



Voor de som 20 PFAS in PFOA equivalenten worden alle gemeten 20 PFAS meegenomen waar een RPF factor voor bekend is (Tabel 1). Waar een range RPF beschikbaar is wordt hier het midden genomen van de range.

In Figuur 8 zijn de berekende sommen PFAS weergegeven. De som 20 PFAS is aangegeven in bruin, de som 20 PFAS in PFOA equivalenten in geel en de som 4 PFAS in PFOA equivalenten in oranje. Voor alle sommen geldt: voor zover gemeten zijn de PFAS meegeteld, en voor de som 20 PFAS in PFOA equivalenten ook voor zover een RPF beschikbaar is.





Figuur 8. De som PFAS voor locaties in de Rijn en Maas. De groene lijn geeft de EU Richtlijn som 20 PFAS van 0,1 µg/l aan. Bruin: som 20 PFAS. Geel: som 20 PFAS in PFOA equivalenten. Oranje: som 4PFAS in PFOA equivalenten. Omdat vaak alleen de 4 PFAS een meetwaarde hebben, vallen deze in veel gevallen over de 20 PFAS heen. Niet alle PFAS zijn gemeten in alle jaren of locaties. Is een PFAS onder de RG weergegeven, dan is deze ook niet meegerekend. De som PFAS hier weergegeven is dus een conservatieve schatting.

Tot en met 2012 komt de som 20 PFAS boven de 0,1 µg/l uit in Lobith, Keizersveer, en Nieuwegein. Recent komt de som PFAS en som PFAS in PFOA equivalenten op alle locaties *niet* boven de 0,1 µg/l uit. Dit betekent dat recent, in combinatie met de EU richtlijn (2020) er geen zuiveringsopgave is voor PFAS. Daardoor is de zuiveringsopgave-inspanning op deze locaties voor PFAS nul voor recente jaren. Wel moet gezegd worden dat de PFAS sommen conservatief zijn, doordat PFAS onder RG niet zijn meegeteld en niet alle PFAS zijn gemeten.

5. Discussie en samenvatting

Op basis van de validatie hoeven we de vuistregels voor zuivering efficiëntie voor PFAS niet te verwerpen voor RO, (geavanceerde) oxidatie, en actief kool. Voor conventionele zuivering verwerpen we de vuistregel wel. De gemeten zuivering komt niet overeen met de berekende zuivering van de vuistregel voor conventionele zuivering op basis van logKow.

Er zal voor conventionele zuivering en alternatieve vuistregel moeten worden vastgesteld, speciaal voor PFAS. Als er meer meetgegevens van meer PFAS beschikbaar komen, zal de vuistregel betrouwbaarder afgeleid kunnen worden.

Het ziet er naar uit dat er geen grote verschillen in zuiveringsefficiëntie tussen waterrelevante PFAS verwacht hoeven worden omdat in de PCA analyse de PFAS vrij dicht bij elkaar clusteren, op basis van de berekeningen met de vuistregels. Omdat conventioneel naar het zich laat aanzien ook niet veel verschil in zuivering heeft voor de verschillende PFAS, zal een nieuwe vuistregel daarvoor niet veel verandering in aanbrengen. De verschillen zitten vooral in de zuivering door actief kool.

De zuivering van PFAS zal naar verwachting vooral in actief kool voor een aantal PFAS goed gaan, en in RO voor alle PFAS. Oxidatie is voor de PFAS niet efficiënt.



Verscheidende modellen voor de voorspelling van de stoffeigenschappen komen redelijk overeen voor PFAS. Wel blijkt dat de eigenschap featureringcount 3D en aromatische ringen voor twee stoffen niet goed voorspeld wordt. Dit zal in het vervolg met de hand gecontroleerd moeten worden. Een andere mogelijkheid is een alternatieve manier te vinden om deze eigenschappen voor stoffen vast te stellen.

De zuiveringsopgave voor PFAS op de locaties aan de Maas en Rijn is in recente jaren nul omdat de som 20 PFAS niet boven de 0,1 µg/l uitkomt. Dit is getest met zowel de simpele som als de som in PFOA equivalenten. Met deze norm dragen de PFAS dus niet bij aan een verhoogde zuiveringsopgave-inspanning voor deze locaties tussen 2013-2018. Wel is het zo dat niet altijd alle PFAS zijn gemeten en de PFAS onder de rapportagegrens als nul zijn meegenomen.

Algehele disclaimer:

Een voorbehoud dat gemaakt moet worden bij de conclusies in deze notitie is dat de vuistregels (te vinden in de KIWK toxicologie notitie ‘Vuistregels voor zuiveringsinspanning’) zijn afgeleid op data van Nederlandse drinkwaterzuiveringsbedrijven. Het is niet getest of deze ook buiten deze dataset een redelijke vuistregel voor verwijdering bieden. Hiervoor is een bestending van de vuistregels met een onafhankelijke dataset of datasets nodig. Niet alle 53 berekende zuiveringsefficiënties voor PFAS uit de ZZS lijst en de EU richtlijn konden worden geverifieerd, dit is gedaan op basis van literatuur en voor de conventionele zuivering een aparte dataset op basis van eveneens 8 PFAS. Als er data van meer PFAS beschikbaar komen, kan dit andere inzichten geven.

Referenties

- EFSA (2020) Risk to human health related to the presence of perfluoroalkyl substances in food EFSA Journal 2020;18(9):6223 <https://www.efsa.europa.eu/en/news/pfas-food-efsa-assesses-risks-and-sets-tolerable-intake>
- EU richtlijn, (2020) Standpunt van de Raad in eerste lezing met het oog op de vaststelling van een RICHTLIJN VAN HET EUROPEES PARLEMENT EN DE RAAD betreffende de kwaliteit van voor menselijke consumptie bestemd water (herschikking) - Vastgesteld door de Raad op 23 oktober 2020 <https://data.consilium.europa.eu/doc/document/ST-6230-2020-REV-3/nl/pdf>
- Kim, M., Li, L. Y., Grace, J. R., & Yue, C. (2015). Selecting reliable physicochemical properties of perfluoroalkyl and polyfluoroalkyl substances (PFASs) based on molecular descriptors. Environmental Pollution, 196, 462–472. <https://doi.org/10.1016/j.envpol.2014.11.008>
- Pronk, T. E., Hofman-Caris, R. C. H. M., Vries, D., Kools, S. A. E., ter Laak, T. L., Stroomberg, G. J. (2021) A water quality index for the removal requirement and purification treatment effort of micropollutants. Water Supply 21 (1): 128–145. doi: <https://doi.org/10.2166/ws.2020.289>
- RIVM (2019) Per- and polyfluoroalkyl substances (PFASs) in food contact materials. RIVM Letter report 2018- 0181 B.G.H. Bokkers et al.
- RIVM (2017) Evaluatie signaleringsparameter nieuwe stoffen drinkwaterbeleid. RIVM Rapport 2017-0091 N.G.F.M. van der Aa et al.



Bijlage I: PFAS eigenschappen en zuivering via vuistregels

Tabel A Bijlage I. lijst van ZZS PFAS (RIVM, website risico van stoffen) en som 20 PFAS (EU richtlijn, 2020), met eigenschappen en berekende zuivering naar aanleiding van vuistregels. Blauwe regels: PFAS uit de som 20 PFAS. De vuistregel voor conventionele zuivering is voor PFAS niet geschikt, blijkt uit deze notitie. Voor de rest van de PFAS is dit een grove schatting.

PREFERRED_NAME	CASNUMBER	LOGP	LOGKOA	AVERAGE_MASS	FeatureKringCount3D	abonds	TreatConventional	TreatActivecoal	TreatOxidation	TreatAdoxidante	TreatRO
Tetrafluoroethylene	116-14-3	1.5	1.0	100.0	0	0	24	0	22	20	48
Lithium nonafluorobutane-1-sulfonate	131651-65-5	3.1	4.2	306.0	0	0	69	49	22	20	96
Perfluoro-2-methyl-3-oxahexanoic acid	13252-13-6	3.0	3.7	330.1	0	0	66	35	22	20	97
N-Ethyl-N-(2-hydroxyethyl)perfluorooctanesulfonamide	1691-99-2	4.9	7.5	571.3	0	0	93	73	22	20	99
Perfluorooctanesulfonic acid	1763-23-1	5.6	4.7	500.1	0	0	96	64	22	20	99
Perfluoroundecanoic acid	2058-94-8	4.0	4.7	564.1	0	0	86	63	22	20	99
Perfluoro(2-methyl-3-oxahexanoyl) fluoride	2062-98-8	3.4	2.3	332.0	0	0	75	3	22	20	97
Sodium heptadecafluorononanoate	21049-39-8	2.1	4.2	486.1	0	0	40	51	22	20	99
2-(N-Methylperfluorooctanesulfonamido)acetic acid	2355-31-9	4.7	7.5	571.2	0	0	92	73	22	20	99
N-Methyl-N-(2-hydroxyethyl)perfluorooctanesulfonamide	24448-09-7	4.6	6.7	557.2	0	0	91	73	22	20	99
N,N,N,-Triethylethanaminium 1,1,2,2,3,3,4,4,4-nonafluorobutane-1-sulfonate	25628-08-4	4.5	5.0	428.3	0	0	91	67	22	20	99
Perfluoropentanoic acid	2706-90-3	1.4	3.8	264.0	0	0	22	35	22	20	94
Perfluoropentanesulfonic acid	2706-91-4	3.4	4.2	350.1	0	0	75	51	22	20	97
Potassium perfluorooctanesulfonate	2795-39-3	-1.1	4.7	538.2	0	0	1	64	22	20	99
Ammonium perfluorooctanesulfonate	29081-56-9	5.2	4.7	517.2	0	0	95	64	22	20	99
Potassium perfluorobutanesulfonate	29420-49-3	0.3	4.2	338.2	1*	5*	7	49	59	79	97
Lithium perfluorooctanesulfonate	29457-72-5	5.3	4.7	506.1	1*	6*	95	64	65	79	99
2-(N-Ethylperfluorooctanesulfonamido)acetic acid	2991-50-6	5.3	7.7	585.2	0	0	95	73	22	20	99
Perfluorohexanoic acid	307-24-4	2.9	3.8	314.1	0	0	62	38	22	20	96
Perfluorooctanesulfonyl fluoride	307-35-7	5.2	3.3	502.1	0	0	95	21	22	20	99
Perfluorododecanoic acid	307-55-1	5.2	4.8	614.1	0	0	95	64	22	20	99
Ammonium perfluorodecanoate	3108-42-7	4.4	4.3	531.1	0	0	90	53	22	20	99
N-Methylperfluorooctanesulfonamide	31506-32-8	5.3	4.6	513.2	0	0	95	60	22	20	99



Perfluoroheptane	335-57-9	3.9	1.4	388.1	0	0	84	1	22	20	98
Perfluorooctanoic acid	335-67-1	3.1	4.2	414.1	0	0	69	49	22	20	98
Perfluorodecanoic acid	335-76-2	4.2	4.3	514.1	0	0	87	53	22	20	99
Perfluorodecanesulfonic acid	335-77-3	5.6	5.8	600.1	0	0	96	72	22	20	99
1-Butanesulfonamide, 1,1,2,2,3,3,4,4,4-nonafluoro-N-(2-hydroxyethyl)-N-methyl-	34454-97-2	2.7	4.9	357.2	0	0	59	67	22	20	98
Perfluorohexanesulfonic acid	355-46-4	2.2	4.3	400.1	0	0	43	53	22	20	98
Perfluorobutanoic acid	375-22-4	1.4	3.5	214.0	0	0	23	25	22	20	90
Perfluorobutanesulfonyl fluoride	375-72-4	3.5	2.3	302.1	0	0	78	3	22	20	96
Perfluorobutanesulfonic acid	375-73-5	3.1	4.2	300.1	0	0	69	49	22	20	96
Perfluoroheptanoic acid	375-85-9	2.1	4.1	364.1	0	0	39	47	22	20	98
Perfluoroheptanesulfonic acid	375-92-8	4.3	4.7	450.1	0	0	89	63	22	20	99
Perfluorononanoic acid	375-95-1	3.5	4.2	464.1	0	0	78	51	22	20	99
Perfluorotetradecanoic acid	376-06-7	5.1	5.8	714.1	0	0	94	72	22	20	100
Perfluoroisobutene	382-21-8	2.9	0.4	200.0	0	0	64	0	22	20	88
Ammonium perfluorooctanoate	3825-26-1	3.9	4.2	431.1	0	0	84	49	22	20	99
Sodium perfluorodecanoate	3830-45-3	3.6	4.3	536.1	0	0	79	53	22	20	99
Ammonium perfluorononanoate	4149-60-4	4.6	4.2	481.1	0	0	92	51	22	20	99
N-Ethylperfluorooctanesulfonamide	4151-50-2	6.8	4.9	527.2	0	0	98	66	22	20	99
Perfluorononanesulfonate	474511-07-4	6.3	5.0	549.1	0	0	97	67	22	20	99
Magnesium nonafluorobutanesulfonate	507453-86-3	0.9	4.2	622.5	0	0	14	49	22	20	100
Ammonium perfluoro-2-methyl-3-oxahexanoate	62037-80-3	2.2	3.7	347.1	0	0	42	35	22	20	97
Potassium 2,3,3,3-tetrafluoro-2-(heptafluoropropoxy)propanoate	67118-55-2	0.4	3.7	368.1	0	0	8	35	22	20	98
Ammonium perfluorobutanesulfonate	68259-10-9	3.1	4.2	317.1	0	0	69	49	22	20	97
Bis(2-hydroxyethyl)ammonium perfluorooctanesulfonic acid	70225-14-8	0.6	4.7	605.3	0	0	10	64	22	20	99
Perfluorotridecanoic acid	72629-94-8	5.4	5.0	664.1	0	0	95	67	22	20	100
Perfluoroundecanesulfonic acid	749786-16-1	5.6	6.0	650.2	0	0	96	72	22	20	100
Perfluorooctanesulfonamide	754-91-6	5.0	4.3	499.1	0	0	94	54	22	20	99
Perfluorotridecanesulfonic acid	791563-89-8	7.3	6.9	750.2	0	0	98	73	22	20	100
Perfluorododecanesulfonic acid	79780-39-5	6.3	6.3	700.2	0	0	97	73	22	20	100

* De eigenschappen FeatureRingCount3D en abonds zijn hier niet goed voorspeld, en zouden nul moeten zijn.

Tabel B Bijlage I. Vergelijking voorspelde LogP (Opera model) en experimenteel vastgestelde LogKow (Pubmed).



<i>PREFERRED_NAME</i>	<i>CASNUMBER</i>	<i>LOGP</i>	<i>LOG P PUBMED</i>
Perfluorooctanesulfonic acid	1763-23-1	5.6	4.49
Perfluoroundecanoic acid	2058-94-8	4.0	-
Perfluoropentanoic acid	2706-90-3	1.4	-
Perfluoropentanesulfonic acid	2706-91-4	3.4	-
Perfluorohexanoic acid	307-24-4	2.9	2.85
Perfluorododecanoic acid	307-55-1	5.2	-
Perfluorooctanoic acid	335-67-1	3.1	3.1
Perfluorodecanoic acid	335-76-2	4.2	4.15
Perfluorodecanesulfonic acid	335-77-3	5.6	-
Perfluorohexanesulfonic acid	355-46-4	2.2	2.2
Perfluorobutanoic acid	375-22-4	1.4	1.43
Perfluorobutanesulfonic acid	375-73-5	3.1	-
Perfluoroheptanoic acid	375-85-9	2.1	2.02
Perfluoroheptanesulfonic acid	375-92-8	4.3	-
Perfluorononanoic acid	375-95-1	3.5	3.54
Perfluorononanesulfonate	474511-07-4	6.3	-
Perfluorotridecanoic acid	72629-94-8	5.4	-
Perfluoroundecanesulfonic acid	749786-16-1	5.6	-
Perfluorotridecanesulfonic acid	791563-89-8	7.3	-
Perfluorododecanesulfonic acid	79780-39-5	6.3	-

