



Labors: Analytik, Ökotoxikologie,
Verfahrenstechnik

ANALYSEN-BERICHT

HPC Harress Pickel Consult AG
Martin Steckermeier
Nansenstrasse 5
79539 Lörrach

Schlieren, 18. Oktober 2010

Projekt: DU II "Kesslergrube", Grenzach-Wyhlen
BMG Auftragsnummer: A10-00306
Datum Auftrag: 16. Februar 2010
Datum Analysen: 16. Februar - 12. Mai 2010

Probenliste & Untersuchungsauftrag

Anzahl Proben 50

Parameter	Anz.	Bestimmungsmethode	BMG SAA-Nr
Screening organische Substanzen	50	GC-MS	BMG-0170

Bemerkungen Die mit einem * markierten Prüfungen sind nicht im Geltungsbereich der Akkreditierung nach ISO/IEC 17025. Ohne gegenteilige schriftliche Mitteilung werden Feststoffproben sechs Monate und Wasserproben drei Monate nach Probeneingang entsorgt.
Die angegebenen Messwerte beziehen sich ausschliesslich auf die bezeichneten Proben. Angaben zu den Prüfspezifikationen (Bestimmungsgrenze, Messunsicherheit) können auf Anfrage abgegeben werden. Der Bericht darf nicht auszugsweise ohne schriftliche Zustimmung des Labors vervielfältigt werden.

Resultate siehe nächste Seite(n).


dipl. Chem. ETH Marina Kuster
Leiterin Analytik

BMG ENGINEERING AG

Labors:
Ifangstrasse 11
CH-8952 Schlieren/Zürich

Tel. 044 732 92 92 • Fax 044 732 92 21
labors@bmgeg.ch
www.bmgeg.ch

Seite 1 von 5



S SCHWEIZERISCHER PRÜFSTELLENDIENST
T SERVICE D'ESSAI
S SERVIZIO DIE PROVA IN SVIZZERA
S SWISS TESTING SERVICE

STS-No. 166

Auftraggeber
Projekt
Auftrag Nr.
Datum Bericht

HPC Harress Pickel Consult AG
DU II "Kesslergrube", Grenzach-Wyhlen
A10-00306
18.10.2010

Probenbezeichnung	CI 34	P 1	CI 37	P 14		
Tiefe						
Datum Probenahme						
Interne Probenbezeichnung	M1002-01613	M1002-01614	M1002-01615	M1002-01616		
Datum Probeneingang	16.02.2010	16.02.2010	16.02.2010	16.02.2010		
Probenart	Wasser	Wasser	Wasser	Wasser		
Organische Summenparameter						
Screening organische Substanzen	siehe Anhang 1	siehe Anhang 2	siehe Anhang 3	siehe Anhang 4		

Probenbezeichnung	KE 27	P 10a	Blind 1	KE 22		
Tiefe						
Datum Probenahme						
Interne Probenbezeichnung	M1002-01617	M1002-01618	M1002-01619	M1002-01620		
Datum Probeneingang	16.02.2010	16.02.2010	16.02.2010	16.02.2010		
Probenart	Wasser	Wasser	Wasser	Wasser		
Organische Summenparameter						
Screening organische Substanzen	siehe Anhang 5	siehe Anhang 6	siehe Anhang 7	siehe Anhang 8		

Probenbezeichnung	Blind 2	CI 35	P 13	CI 32		
Tiefe						
Datum Probenahme						
Interne Probenbezeichnung	M1002-01621	M1002-01622	M1002-01623	M1002-01624		
Datum Probeneingang	16.02.2010	16.02.2010	16.02.2010	16.02.2010		
Probenart	Wasser	Wasser	Wasser	Wasser		
Organische Summenparameter						
Screening organische Substanzen	siehe Anhang 9	siehe Anhang 10	siehe Anhang 11	siehe Anhang 12		

Probenbezeichnung	CI 31	KE 35	S 3	KE 36		
Tiefe						
Datum Probenahme						
Interne Probenbezeichnung	M1002-01625	M1002-01626	M1002-01627	M1002-01628		
Datum Probeneingang	16.02.2010	16.02.2010	16.02.2010	16.02.2010		
Probenart	Wasser	Wasser	Wasser	Wasser		
Organische Summenparameter						
Screening organische Substanzen	siehe Anhang 13	siehe Anhang 14	siehe Anhang 15	siehe Anhang 16		

Auftraggeber
Projekt
Auftrag Nr.
Datum Bericht

HPC Harress Pickel Consult AG
DU II "Kesslergrube", Grenzach-Wyhlen
A10-00306
18.10.2010

Probenbezeichnung	Br 49	KE 29	KE 30	KE 38		
Tiefe						
Datum Probenahme						
Interne Probenbezeichnung	M1002-01629	M1002-01630	M1002-01631	M1002-01632		
Datum Probeneingang	17.02.2010	17.02.2010	17.02.2010	17.02.2010		
Probenart	Wasser	Wasser	Wasser	Wasser		
Organische Summenparameter						
Screening organische Substanzen	siehe Anhang 17	siehe Anhang 18	siehe Anhang 19	siehe Anhang 20		

Probenbezeichnung	KE 21	KE 40	KE 33	P 7		
Tiefe						
Datum Probenahme						
Interne Probenbezeichnung	M1002-01633	M1002-01634	M1002-01635	M1002-01636		
Datum Probeneingang	17.02.2010	17.02.2010	17.02.2010	17.02.2010		
Probenart	Wasser	Wasser	Wasser	Wasser		
Organische Summenparameter						
Screening organische Substanzen	siehe Anhang 21	siehe Anhang 22	siehe Anhang 23	siehe Anhang 24		

Probenbezeichnung	KE 24	P 8	P 5	P 4		
Tiefe						
Datum Probenahme						
Interne Probenbezeichnung	M1002-01637	M1002-01638	M1002-01639	M1002-01640		
Datum Probeneingang	17.02.2010	17.02.2010	17.02.2010	17.02.2010		
Probenart	Wasser	Wasser	Wasser	Wasser		
Organische Summenparameter						
Screening organische Substanzen	siehe Anhang 25	siehe Anhang 26	siehe Anhang 27	siehe Anhang 28		

Probenbezeichnung	P 16a	Blind 4	Blind 3	P 2		
Tiefe						
Datum Probenahme						
Interne Probenbezeichnung	M1002-01641	M1002-01642	M1002-01643	M1002-01644		
Datum Probeneingang	17.02.2010	17.02.2010	17.02.2010	17.02.2010		
Probenart	Wasser	Wasser	Wasser	Wasser		
Organische Summenparameter						
Screening organische Substanzen	siehe Anhang 29	siehe Anhang 30	siehe Anhang 31	siehe Anhang 32		

Auftraggeber
Projekt
Auftrag Nr.
Datum Bericht

HPC Harress Pickel Consult AG
DU II "Kesslergrube", Grenzach-Wyhlen
A10-00306
18.10.2010

Probenbezeichnung	KE 31	CI 36	KE 41	KE 32		
Tiefe						
Datum Probenahme						
Interne Probenbezeichnung	M1002-01645	M1002-01646	M1002-01647	M1002-01648		
Datum Probeneingang	17.02.2010	17.02.2010	17.02.2010	17.02.2010		
Probenart	Wasser	Wasser	Wasser	Wasser		
Organische Summenparameter						
Screening organische Substanzen	siehe Anhang 33	siehe Anhang 34	siehe Anhang 35	siehe Anhang 36		

Probenbezeichnung	CI 33	KE 26	P 15	KE 20		
Tiefe						
Datum Probenahme						
Interne Probenbezeichnung	M1002-01649	M1002-01650	M1002-01651	M1002-01652		
Datum Probeneingang	17.02.2010	17.02.2010	17.02.2010	17.02.2010		
Probenart	Wasser	Wasser	Wasser	Wasser		
Organische Summenparameter						
Screening organische Substanzen	siehe Anhang 37	siehe Anhang 38	siehe Anhang 39	siehe Anhang 40		

Probenbezeichnung	KE 25	KE 39	KE 34	P 3		
Tiefe						
Datum Probenahme						
Interne Probenbezeichnung	M1002-01654	M1002-01655	M1002-01656	M1002-01676		
Datum Probeneingang	17.02.2010	17.02.2010	17.02.2010	18.02.2010		
Probenart	Wasser	Wasser	Wasser	Wasser		
Organische Summenparameter						
Screening organische Substanzen	siehe Anhang 41	siehe Anhang 42	siehe Anhang 43	siehe Anhang 44		

Probenbezeichnung	P 11	KE 37	KE 43	KE 28		
Tiefe						
Datum Probenahme						
Interne Probenbezeichnung	M1002-01677	M1002-01678	M1002-01679	M1002-01680		
Datum Probeneingang	18.02.2010	18.02.2010	18.02.2010	18.02.2010		
Probenart	Wasser	Wasser	Wasser	Wasser		
Organische Summenparameter						
Screening organische Substanzen	siehe Anhang 45	siehe Anhang 46	siehe Anhang 47	siehe Anhang 48		



Labors: Analytik, Ökotoxikologie,
Verfahrenstechnik

Auftraggeber
Projekt
Auftrag Nr.
Datum Bericht

HPC Harress Pickel Consult AG
DU II "Kesslergrube", Grenzach-Wyhlen
A10-00306
18.10.2010

Probenbezeichnung	P 12	KE 42				
Tiefe						
Datum Probenahme						
Interne Probenbezeichnung	M1002-01681	M1003-01930				
Datum Probeneingang	18.02.2010	18.02.2010				
Probenart	Wasser	Wasser				
Organische Summenparameter						
Screening organische Substanzen	siehe Anhang 49	siehe Anhang 50				

Screening von Organischen Substanzen im Wasser:

Probenaufbereitung und Messbedingungen

Extraktionsmittel	Dichlormethan																		
Extraktion	Die Probe wird nach Zugabe von internen Standards zweimal extrahiert. Zuerst bei pH=2, danach bei pH=9. Die zwei Extrakte werden zusammengegeben und aufkonzentriert.																		
Anreicherungsfaktor	ca. 10-1000																		
GC-MS Bedingungen	<table> <tr> <td>Gaschromatograph:</td><td>Finnigan: Trace Ultra</td></tr> <tr> <td>Säule:</td><td>DB5ms, 30m x 0.25 mm, 0.25 µm</td></tr> <tr> <td>Injektion:</td><td>2 µl; Splitless</td></tr> <tr> <td>Temperaturprogramm:</td><td>40°C, 2 Min.; 6°C/Min bis 280°C; 10°C bis 300°C; 6 Min.</td></tr> <tr> <td>Massenselektiver Detektor:</td><td>Single Quadrupole</td></tr> <tr> <td>Ionisierung:</td><td>El; 70 eV</td></tr> <tr> <td>Massen:</td><td>33 - 500 m/z</td></tr> <tr> <td>Scangeschwindigkeit</td><td>3 Scans/Sek.</td></tr> <tr> <td>Bibliothek:</td><td>NIST 08</td></tr> </table>	Gaschromatograph:	Finnigan: Trace Ultra	Säule:	DB5ms, 30m x 0.25 mm, 0.25 µm	Injektion:	2 µl; Splitless	Temperaturprogramm:	40°C, 2 Min.; 6°C/Min bis 280°C; 10°C bis 300°C; 6 Min.	Massenselektiver Detektor:	Single Quadrupole	Ionisierung:	El; 70 eV	Massen:	33 - 500 m/z	Scangeschwindigkeit	3 Scans/Sek.	Bibliothek:	NIST 08
Gaschromatograph:	Finnigan: Trace Ultra																		
Säule:	DB5ms, 30m x 0.25 mm, 0.25 µm																		
Injektion:	2 µl; Splitless																		
Temperaturprogramm:	40°C, 2 Min.; 6°C/Min bis 280°C; 10°C bis 300°C; 6 Min.																		
Massenselektiver Detektor:	Single Quadrupole																		
Ionisierung:	El; 70 eV																		
Massen:	33 - 500 m/z																		
Scangeschwindigkeit	3 Scans/Sek.																		
Bibliothek:	NIST 08																		

Generelle Bemerkungen zu den Screenings

% Fit: Übereinstimmung mit Bibliotheksspektren; Es werden nur Substanzen mit Namen angegeben wenn die Übereinstimmung mit den Bibliotheksspektren > 80% ist. Substanzen mit geringerer Übereinstimmung werden als "unbekannt" bezeichnet und zusätzlich zum Hauptfragment werden weitere Massenfragmente angegeben.

Diese Screenings sind semiquantitativ; die Gehaltsangabe erfolgt als Bereichsangabe (= 50 % - 200% des berechneten Wertes).

Die Berechnung der Gehalte erfolgt über einen Flächenvergleich mit 1-Chlordodecan. Falls die Substanz eine aromatische oder polyaromatische Struktur aufweist wird die Berechnung mit Nitrobenzol d5 bzw. Naphthalin d8 angegeben.

* Identifizierung wurde mit Deconvolution software AMDIS (von NIST, USA) bestätigt

Auftraggeber
Projekt
Auftrag Nr.
Datum

HPC Harress Pickel Consult AG
U II "Kesslergrube", Grenzach-Wyhlen
A10-00306
09.04.2010

Anhang: **1**

Probenbezeichnung: CI 34			Int. Probennummer: M1002-01613				
Interne Standards							
Nr.	Name des Internen Standards (I.S.)	Konzentration (µg/l)	Wiederfindung (%)		Bemerkungen		
a	Anilin d5	1,05	18				
b	Nitrobenzol d5	1,05	98				
c	Naphthalin d8	1,05	94				
d	1-Chlorododecan	1,05	30				
e	Acenaphthen d10	2,63	-				
						Volumen Standard	
Nachgewiesene Substanzen							
Scan	RT (Min.)	µg/l (I.S. b/c/d)	Massen m/z (fett = Basispeak)	Name, Trivialname oder IUPAC	% Fit	CAS-Nr.	Bemerkungen
6712	42,40	1,83 – 7,3 d	127	Glycerol tricaprylate	88	538-23-8	*
4100	27,92	0,47 – 1,9 d	69	1-Hexadecanol	89	36653-82-4	*
7035	44,19	0,61 – 2,5 c	57,127,155	unbekannt			Verm. Glyceroltriester, biog. Urspr.
7387	46,14	0,35 – 1,4 c	127,155,207,355	unbekannt			Verm. Glyceroltriester, biog. Urspr.

Aufkonzentrierungsfaktor: 600
Bestimmungsgrenze (IS Naphthalin): 0.05 µg/l

Auftraggeber
Projekt
Auftrag Nr.
Datum

HPC Harress Pickel Consult AG
U II "Kesslergrube", Grenzach-Wyhlen
A10-00306
18.10.2010

Anhang: **2**

Probenbezeichnung: P 1					Int. Probennummer: M1002-01614		
Interne Standards							
Nr.	Name des Internen Standards (I.S.)		Konzentration (µg/l)	Wiederfindung (%)		Bemerkungen	
a	Anilin d5		1,07	19			
b	Nitrobenzol d5		1,07	77			
c	Naphthalin d8		1,07	84			
d	1-Chlorododecan		1,07	93			
e	Acenaphthen d10		2,68	-			
Nachgewiesene Substanzen							
Scan	RT (Min.)	µg/l (I.S. b/c/d)	Massen m/z (fett = Basispeak)	Name, Trivialname oder IUPAC	% Fit	CAS-Nr.	Bemerkungen
1886	15,65	0,5 – 2,2 b	135	Benzenamine, 2,4,6-trimethyl-	86	88-05-1	
1923	15,86	0,9 – 3,4 b	158	4-Chloro-2-methylthiophenol	84	17178-01-7	
2013	16,35	0,3 – 1,4 d	57,97,113	unbekannt			
2185	17,31	0,4 – 1,7 b	161	Benzenamine, 2,3-dichloro-	87	608-27-5	
2207	17,43	1,0 – 4,1 d	109,124,152	unbekannt			
2517	19,15	0,7 – 2,8 d	112	unbekannt			
2783	20,62	0,8 – 3,3 d	79,81,122	unbekannt			Hinweis auf Terpenoid
2815	20,80	0,3 – 1,1 d	192	Sulfur	88	13798-23-7	
2842	20,95	1,7 – 6,8 b	119,118,174	unbekannt			Hinweis auf Benzoesäure
2860	21,05	3,1 – 12,3 d	123,137,180	unbekannt			
2918	21,37	0,7 – 3,0 d	43,73,101	unbekannt			
3000	21,82	0,9 – 3,8 d	137,151,183	unbekannt			
3027	21,97	2,8 – 11,2 b	140	Methyprylon	90	125-64-4	
3119	22,48	0,7 – 2,7 d	73,98,170	unbekannt			
3166	22,74	1,9 – 7,5 d	69,143,169	unbekannt			
3353	23,78	0,6 – 2,5 d	73,153,195	unbekannt			
3386	23,96	0,5 – 2,1 d	81,139,153	unbekannt			
3435	24,24	3,9 – 15,5 d	123,135,209	unbekannt			
3475	24,46	2,4 – 9,5 d	43,125,126	unbekannt			
3591	25,10	1,0 – 4,1 d	43,97,125	unbekannt			
3673	25,55	0,7 – 3,0 d	73,125,167	unbekannt			
3787	26,19	9,8 – 39,1 d	112,137,165	unbekannt			
3813	26,33	1,5 – 6,1 d	69,181,184	unbekannt			
3873	26,66	5,3 – 21,0 b	206	Coumarin-6-ol, 3,4-dihydro-5,7,8-trimethyl-	81	40740-31-6	
3927	26,96	13,9 – 55,6 b	137	2-Allyl-3-ethoxy-4-methoxyphenol	81	NA	
4169	28,30	0,6 – 2,4 d	178	unbekannt			
4293	28,99	0,4 – 1,5 d	43,127,155	unbekannt			
4431	29,76	1,8 – 7,2 d	155,183	unbekannt			
4465	29,94	1,9 – 7,7 d	155,183	unbekannt			
4545	30,39	2,7 – 10,9 d	256	Cyclic octaatomic sulfur	88	10544-50-0	
4613	30,77	3,7 – 14,6 d	142,148,169	unbekannt			
4644	30,94	9,9 – 39,6 b	148	unbekannt			Hinweis auf Aromat
5090	33,41	0,9 – 3,6 b	159,230,231	unbekannt			Hinweis auf Aromat
5399	35,12	0,5 – 1,9 b	227	Indole, 2-(4-chlorophenyl)-	85	1211-35-4	
5813	37,42	1,0 – 4,0 b	277	Triphenylphosphine oxide	85	791-28-6	

Auftraggeber
Projekt
Auftrag Nr.
Datum

HPC Harress Pickel Consult AG
U II "Kesslergrube", Grenzach-Wyhlen
A10-00306
18.10.2010

Anhang: **2**

Probenbezeichnung: P 1				Int. Probennummer: M1002-01614			
Interne Standards							
Nr.	Name des Internen Standards (I.S.)	Konzentration (µg/l)	Wiederfindung (%)		Bemerkungen		
a	Anilin d5	1,07	19				
b	Nitrobenzol d5	1,07	77				
c	Naphthalin d8	1,07	84				
d	1-Chlorododecan	1,07	93				
e	Acenaphthen d10	2,68	-				
Nachgewiesene Substanzen							
Scan	RT (Min.)	µg/l (I.S. b/c/d)	Massen m/z (fett = Basispeak)	Name, Trivialname oder IUPAC	% Fit	CAS-Nr.	Bemerkungen
1038	10,95	0,4 – 1,6 d	71 43,45,73	unbekannt			
1963	16,08	0,3 – 1,0 d	113 43,71,148	unbekannt			
2416	18,59	0,3 – 1,2 d	115 86,87,152	unbekannt			
2450	18,78	0,3 – 1,1 d	135 69,107,124	unbekannt			
2544	19,30	0,2 – 0,8 d	86 123,138,166	unbekannt			
2580	19,50	0,5 – 1,9 d	132 131,161,163	unbekannt			
2609	19,66	0,2 – 1,0 d	112 43,68,84	unbekannt			
2647	19,87	0,3 – 1,1 d	98 43,83,141	unbekannt			
2798	20,70	0,3 – 1,0 d	163 123,138,166	unbekannt			
2877	21,14	0,5 – 1,9 d	138 55,69,139	unbekannt			
2942	21,50	0,4 – 1,4 d	73 43,45,98	unbekannt			
4202	28,49	0,5 – 1,9 d	202 77,110,201	unbekannt			
4856	32,11	0,3 – 1,4 d	144 103,130,145	unbekannt			
5189	33,96	0,2 – 1,0 d	244 148,188,201	unbekannt			
6970	43,83	0,3 – 1,3 d	321 57,71,182	unbekannt			

Aufkonzentrierungsfaktor: 550
Bestimmungsgrenze (IS Naphthalin): 0.2 µg/l

Auftraggeber
Projekt
Auftrag Nr.
Datum

HPC Harress Pickel Consult AG
U II "Kesslergrube", Grenzach-Wyhlen
A10-00306
09.04.2010

Anhang: **3**

Probenbezeichnung: CI 37			Int. Probennummer: M1002-01615				
Interne Standards							
Nr.	Name des Internen Standards (I.S.)		Konzentration (µg/l)	Wiederfindung (%)		Bemerkungen	
a	Anilin d5		1,05	19			
b	Nitrobenzol d5		1,05	101			
c	Naphthalin d8		1,05	101			
d	1-Chlorododecan		1,05	26			
e	Acenaphthen d10		2,63	-			
Volumen Standard							
Nachgewiesene Substanzen							
Scan	RT (Min.)	µg/l (I.S. b/c/d)	Massen m/z (fett = Hauptfragment)	Name, Trivialname oder IUPAC	% Fit	CAS-Nr.	Bemerkungen
3934	27,00	0,36 – 1,4 d	60,102,211,228	Isopropylmyristat	84	110-27-0	*
4100	27,92	1,92 – 7,7 d	69,113	2-Methyl-2-Propenic acid	75	109-16-0	*
4867	32,17	1,18 – 4,7 d	113	2-Propenoic acid, 2-methyl-, 1,2-ethanediylbis(oxy-2,1-ethanediyl) ester	87	109-16-0	*

Aufkonzentrierungsfaktor: 640
Bestimmungsgrenze (IS Naphthalin): 0.05 µg/l

Auftraggeber
Projekt
Auftrag Nr.
Datum

HPC Harress Pickel Consult AG
U II "Kesslergrube", Grenzach-Wyhlen
A10-00306
09.04.2010

Anhang: **4**

Probenbezeichnung: P 14					Int. Probennummer: M1002-01616				
Interne Standards									
Nr.	Name des Internen Standards (I.S.)			Konzentration (µg/l)	Wiederfindung (%)		Bemerkungen		
a	Anilin d5			1,06	27				
b	Nitrobenzol d5			1,06	107				
c	Naphthalin d8			1,06	108				
d	1-Chlorododecan			1,06	64				
e	Acenaphthen d10			2,65	-		Volumen Standard		
Nachgewiesene Substanzen									
Scan	RT (Min.)	µg/l (I.S. b/c/d)			Massen m/z (fett = Basispeak)	Name, Trivialname oder IUPAC	% Fit	CAS-Nr.	Bemerkungen
2306	17,98	0,15	– 0,6	d	172	110,157	unbekannt		chlorierter Alkoxyaromat
2340	18,17	0,16	– 0,6	d	172	157,174	unbekannt		chlorierter Alkoxyaromat
3165	22,74	0,63	– 2,5	d	171	173,188	unbekannt		chloriert, O-haltig, Aromat
3255	23,24	0,19	– 0,8	d	171	173	unbekannt		Isomer zu Scan 3165
3291	23,44	0,35	– 1,4	d	204	89,125,141,206	unbekannt		Isomer zu p-Methylsulfonylbenzylchlorid
3428	24,20	0,13	– 0,5	d	205	205,236	unbekannt		chloriert, aromatisch
3819	26,37	0,17	– 0,7	d	232	93,19	unbekannt		ev. 1-Phenyl-3-Methyl-4-Hydroxy-4-(Prop-2-yl)-2,5-Dihydropyrrazol-5-on oder Isomer (Wiley9), f/RF 72/83%
3857	26,58	0,23	– 0,9	d	137	165,208	unbekannt		Terpenoid, verm. Biogen
4137	28,13	0,11	– 0,4	d	202		unbekannt		polyzyklisch, aromatisch
4443	29,83	0,37	– 1,5	d	148		unbekannt		Isomer zu Ethoxymethyl-6-methyl-2-Oxo-1,2-Dihydropyridin-3-Carbonitril
4603	30,72	0,13	– 0,5	d	71	73	unbekannt		Zuckerartige Verbindung
5628	36,40	0,12	– 0,5	d	171	99	unbekannt		ev. Fettsäureester

Aufkonzentrierungsfaktor:

550

Bestimmungsgrenze (IS Naphthalin):

0.05 µg/l

Auftraggeber
Projekt
Auftrag Nr.
Datum

HPC Harress Pickel Consult AG
U II "Kesslergrube", Grenzach-Wyhlen
A10-00306
09.04.2010

Anhang: **5**

Probenbezeichnung: KE 27				Int. Probennummer:				M1002-01617		
Interne Standards										
Nr.	Name des Internen Standards (I.S.)			Konzentration (µg/l)	Wiederfindung (%)		Bemerkungen			
a	Anilin d5			1,02	23					
b	Nitrobenzol d5			1,02	89					
c	Naphthalin d8			1,02	93					
d	1-Chlorododecan			1,02	46					
e	Acenaphthen d10			2,56	-		Volumen Standard			
Nachgewiesene Substanzen										
Scan	RT (Min.)	µg/l (I.S. b/c/d)			Massen m/z (fett = Basispeak)	Name, Trivialname oder IUPAC	% Fit	CAS-Nr.	Bemerkungen	
3167	22,77	0,20	–	0,8	d	69,113	Diethyleneglycol dimethacrylate	84	2358-84-1	oder Isomer
4040	27,61	1,64	–	6,6	d	69,113	2-Propenoic acid, 2-methyl-, 1,2-ethanediylbis(oxy-2,1-ethanediyl) ester	87	109-16-0	
4804	31,85	1,75	–	7,0	d	69,113	2-Propenoic acid, 2-methyl-, 1,2-ethanediylbis(oxy-2,1-ethanediyl) ester	84	109-16-0	oder Isomer
6104	39,06	0,25	–	1,0	d	69,113	2-Propenoic acid, 2-methyl-, oxybis(2,1-ethanediyl)oxy-2,1-ethanediyl) ester	81	109-17-1	oder Isomer

Aufkonzentrierungsfaktor: 540
Bestimmungsgrenze (IS Naphthalin): 0.05 µg/l

Auftraggeber
Projekt
Auftrag Nr.
Datum

HPC Harress Pickel Consult AG
U II "Kesslergrube", Grenzach-Wyhlen
A10-00306
09.04.2010

Anhang: **6**

Probenbezeichnung: P 10a			Int. Probennummer: M1002-01618				
Interne Standards							
Nr.	Name des Internen Standards (I.S.)	Konzentration (µg/l)	Wiederfindung (%)		Bemerkungen		
a	Anilin d5	1,05	24				
b	Nitrobenzol d5	1,05	107				
c	Naphthalin d8	1,05	109				
d	1-Chlorododecan	1,05	56				
e	Acenaphthen d10	2,62	-				
Nachgewiesene Substanzen							
Scan	RT (Min.)	µg/l (I.S. b/c/d)	Massen m/z (fett = Hauptfragment)	Name, Trivialname oder IUPAC	% Fit	CAS-Nr.	Bemerkungen
4325	29,17	0,13 – 0,5 d	108,210,211	Benzothiazole,2-phenyl		883-93-2	

Aufkonzentrierungsfaktor: 530
Bestimmungsgrenze (IS Naphthalin): 0.05 µg/l

Auftraggeber
Projekt
Auftrag Nr.
Datum

HPC Harress Pickel Consult AG
U II "Kesslergrube", Grenzach-Wyhlen
A10-00306
09.04.2010

Anhang: **7**

Probenbezeichnung: Blind 1			Int. Probennummer:			M1002-01619	
Interne Standards							
Nr.	Name des Internen Standards (I.S.)	Konzentration (µg/l)	Wiederfindung (%)		Bemerkungen		
a	Anilin d5	1,10	36				
b	Nitrobenzol d5	1,10	121				
c	Naphthalin d8	1,10	125				
d	1-Chlorododecan	1,10	61				
e	Acenaphthen d10	2,74	-		Volumen Standard		
Nachgewiesene Substanzen							
Scan	RT (Min.)	µg/l (I.S. b/c/d)	Massen m/z (fett = Basispeak)	Name, Trivialname oder IUPAC	% Fit	CAS-Nr.	Bemerkungen

Aufkonzentrierungsfaktor: 540
Bestimmungsgrenze (IS Naphthalin): 0.05 µg/l

Auftraggeber
Projekt
Auftrag Nr.
Datum

HPC Harress Pickel Consult AG
U II "Kesslergrube", Grenzach-Wyhlen
A10-00306
09.04.2010

Anhang: **8**

Probenbezeichnung: KE 22				Int. Probennummer: M1002-01620					
Interne Standards									
Nr.	Name des Internen Standards (I.S.)		Konzentration (µg/l)	Wiederfindung (%)		Bemerkungen			
a	Anilin d5		1,04	4					
b	Nitrobenzol d5		1,04	115					
c	Naphthalin d8		1,04	108					
d	1-Chlorododecan		1,04	91					
e	Acenaphthen d10		2,61	-		Volumen Standard			
Nachgewiesene Substanzen									
Scan	RT (Min.)	µg/l (I.S. b/c/d)		Massen m/z (fett = Basispeak)	Name, Trivialname oder IUPAC	% Fit	CAS-Nr.	Bemerkungen	
1242								Nicht erwähnt: Chloranilin	
2751	20,45	0,13	– 0,5	d	64,128,192	Sulfur	91	13798-23-7	Schwefel
3717	25,80	0,11	– 0,4	d	160,224	unbekannt			
4044	27,61	0,24	– 1,0	d	69,53,97	1-Hexadecanol	88	36653-82-4	
4476	30,01	6,36	– 25,4	d	64,128,160,192,256,258	Cyclic octaatomic sulfur	91	10544-50-0	

Aufkonzentrierungsfaktor: 640
Bestimmungsgrenze (IS Naphthalin): 0.05 µg/l

Auftraggeber
Projekt
Auftrag Nr.
Datum

HPC Harress Pickel Consult AG
U II "Kesslergrube", Grenzach-Wyhlen
A10-00306
09.04.2010

Anhang: **9**

Probenbezeichnung: Blind 2				Int. Probennummer: M1002-01621				
Interne Standards								
Nr.	Name des Internen Standards (I.S.)		Konzentration (µg/l)	Wiederfindung (%)		Bemerkungen		
a	Anilin d5		1,05	22				
b	Nitrobenzol d5		1,05	97				
c	Naphthalin d8		1,05	98				
d	1-Chlorododecan		1,05	81				
e	Acenaphthen d10		2,63	-		Volumen Standard		
Nachgewiesene Substanzen								
Scan	RT (Min.)	µg/l (I.S. b/c/d)	Massen m/z (fett = Basispeak)	Name, Trivialname oder IUPAC		% Fit	CAS-Nr.	Bemerkungen

Aufkonzentrierungsfaktor: 630
Bestimmungsgrenze (IS Naphthalin): 0.05 µg/l

Auftraggeber
Projekt
Auftrag Nr.
Datum

HPC Harress Pickel Consult AG
U II "Kesslergrube", Grenzach-Wyhlen
A10-00306
18.05.2010

Anhang: **10**

Probenbezeichnung: CI 32				Int. Probennummer:		M1002-01622	
Interne Standards							
Nr.	Name des Internen Standards (I.S.)		Konzentration (µg/l)	Wiederfindung (%)		Bemerkungen	
a	Anilin d5		1,06	14			
b	Nitrobenzol d5		1,06	93			
c	Naphthalin d8		1,06	97			
d	1-Chlorododecan		1,06	42			
e	Acenaphthen d10		2,65	-		Volumen Standard	
Nachgewiesene Substanzen							
Scan	RT (Min.)	µg/l (I.S. b/c/d)	Massen m/z (fett = Basispeak)	Name, Trivialname oder IUPAC	% Fit	CAS-Nr.	Bemerkungen
2995	21,80	0,24 – 1,0 d	111,154,175	unbekannt	95	4237-44-9	ev. Chlormethylsulfonylbenzol + Koelution
3114	22,46	0,12 – 0,5 d	83,153,166,174	unbekannt			*
3168	22,76	0,18 – 0,7 d	145,152,169	unbekannt			*
3191	22,88	0,20 – 0,8 d	151	unbekannt			*
3350	23,76	0,19 – 0,8 d	89,125,204	unbekannt			Methylsulfonylbenzylchlorid
3474	24,45	0,19 – 0,8 d	125	unbekannt			*
3591	25,10	0,20 – 0,8 d	125	unbekannt			*
3604	25,17	0,22 – 0,9 d	183,198	Phenol, 2-(1-phenylethyl)-			*
3729	25,87	0,32 – 1,3 d	73,129,137	unbekannt			ev. Tetradecansäure
3782	26,16	0,16 – 0,6 d	112,137,165,206	unbekannt			*
3805	26,29	0,45 – 1,8 d	150,178,207,252	unbekannt	*		
3880	26,70	0,36 – 1,4 d	93,190,232	unbekannt			ev. 1-Phenyl-3-methyl-4-hydroxy-4-(propyl-2-yl)2,5-dihydropyrazol-5-on (Wiley9)
3894	26,78	0,25 – 1,0 d	150,178,207,252	unbekannt			*
3917	26,91	0,45 – 1,8 d	137,165,173,246	unbekannt			verm. Terpenoid
4100	27,92	0,65 – 2,6 d	69,113,181,255	unbekannt			*
4198	28,47	0,27 – 1,1 d	110,181,202	unbekannt			*
4429	29,75	0,89 – 3,5 d	183	3-Dibenzofuranamine	80	4106-66-5	*
4463	29,93	0,73 – 2,9 d	183	3-Dibenzofuranamine	80	4106-66-5	*
4602	30,70	0,18 – 0,7 d	169	[1,2,4]Triazolo[4,3-a]quinoline	80	235-06-3	*
4642	30,93	0,16 – 0,6 b	154,195,230	Methanone, (2-amino-5-chlorophenyl)phenyl-	85	719-59-5	* Hinweis auf aromatische Verbindung
4766	31,61	0,19 – 0,8 b	177,219,253	unbekannt			*
4866	32,17	0,25 – 1,0 d	69,113	2-Propenoic acid, 2-methyl-, 1,2-ethanediylobis(oxy-2,1-ethanediy) ester	81	109-16-0	verm. Biogen
5305	34,60	0,12 – 0,5 d	136,236,281	unbekannt			*
5805	37,37	0,81 – 3,2 d	277	Triphenylphosphine oxide	89	791-28-6	*
5855	37,65	0,22 – 0,9 d	149,167	1,2-Benzenedicarboxylic acid, mono(2-ethylhexyl) ester	84	4376-20-9	*
6038	38,66	0,20 – 0,8 d	226,255	unbekannt			Vermutlich 1,1Bis-Isoquinolin
7034	44,18	0,34 – 1,4 d	127,155,201,327	unbekannt			Vermutlich Glyceroltricaprylat
7386	46,14	0,15 – 0,6 d	127,155,229355	unbekannt			

Aufkonzentrierungsfaktor: 630
Bestimmungsgrenze (IS Naphthalin): 0.05 µg/l

Auftraggeber
Projekt
Auftrag Nr.
Datum

HPC Harress Pickel Consult AG
U II "Kesslergrube", Grenzach-Wyhlen
A10-00306
09.04.2010

Anhang: **11**

Probenbezeichnung: P 13				Int. Probennummer:		M1002-01623	
Interne Standards							
Nr.	Name des Internen Standards (I.S.)	Konzentration (µg/l)	Wiederfindung (%)		Bemerkungen		
a	Anilin d5	1,03	23				
b	Nitrobenzol d5	1,03	85				
c	Naphthalin d8	1,03	86				
d	1-Chlorododecan	1,03	61				
e	Acenaphthen d10	2,57	-		Volumen Standard		
Nachgewiesene Substanzen							
Scan	RT (Min.)	µg/l (I.S. b/c/d)	Massen m/z (fett = Basispeak)	Name, Trivialname oder IUPAC	% Fit	CAS-Nr.	Bemerkungen
3293	23,45	0,10 – 0,4 b	125,141,189,204	unbekannt			ev. Chlormethyl-methylsulfonylbenzol

Aufkonzentrierungsfaktor: 570
Bestimmungsgrenze (IS Naphthalin): 0.05 µg/l

Auftraggeber
Projekt
Auftrag Nr.
Datum

HPC Harress Pickel Consult AG
U II "Kesslergrube", Grenzach-Wyhlen
A10-00306
18.05.2010

Anhang: **12**

Probenbezeichnung: CI 35			Int. Probennummer: M1002-01624					
Interne Standards								
Nr.	Name des Internen Standards (I.S.)		Konzentration (µg/l)	Wiederfindung (%)		Bemerkungen		
a	Anilin d5		1,03	22				
b	Nitrobenzol d5		1,03	92				
c	Naphthalin d8		1,03	93				
d	1-Chlorododecan		1,03	22				
e	Acenaphthen d10		2,58	-		Volumen Standard		
Nachgewiesene Substanzen								
Scan	RT (Min.)	µg/l (I.S. b/c/d)	Massen m/z (fett = Basispeak)	Name, Trivialname oder IUPAC		% Fit	CAS-Nr.	Bemerkungen

Aufkonzentrierungsfaktor: 650
Bestimmungsgrenze (IS Naphthalin): 0.05 µg/l

Auftraggeber
Projekt
Auftrag Nr.
Datum

HPC Harress Pickel Consult AG
U II "Kesslergrube", Grenzach-Wyhlen
A10-00306
09.04.2010

Anhang: **13**

Probenbezeichnung: **CI 31** Int. Probennummer: **M1002-01625**

Interne Standards				
Nr.	Name des Internen Standards (I.S.)	Konzentration (µg/l)	Wiederfindung (%)	Bemerkungen
a	Anilin d5	1,04	27	
b	Nitrobenzol d5	1,04	121	
c	Naphthalin d8	1,04	119	
d	1-Chlorododecan	1,04	39	
e	Acenaphthen d10	2,59	-	Volumen Standard

Nachgewiesene Substanzen							
Scan	RT (Min.)	µg/l (I.S. b/c/d)	Massen m/z (fett = Basispeak)	Name, Trivialname oder IUPAC	% Fit	CAS-Nr.	Bemerkungen
4100	27,92	0,47 – 1,9 d	69,113	unbekannt			*
4866	32,17	0,35 – 1,4 d	69,113	2-Propenoic acid, 2-methyl-, 1,2-ethanediylobis(oxy-2,1-ethanediylobis) ester	80	109-16-0	oder Isomer
6713	42,40	0,63 – 2,5 d	57,127	Glycerol tricaprylat	87	538-23-8	
7386	46,13	0,68 – 2,7 d	127,155,207,355	unbekannt			Glyceroltrialkanester

Aufkonzentrierungsfaktor: 740
Bestimmungsgrenze (IS Naphthalin): 0.05 µg/l

Auftraggeber
Projekt
Auftrag Nr.
Datum

HPC Harress Pickel Consult AG
U II "Kesslergrube", Grenzach-Wyhlen
A10-00306
09.04.2010

Anhang: **14**

Probenbezeichnung: KE 35					Int. Probennummer: M1002-01626			
Interne Standards								
Nr.	Name des Internen Standards (I.S.)		Konzentration (µg/l)	Wiederfindung (%)		Bemerkungen		
a	Anilin d5		1,04	10				
b	Nitrobenzol d5		1,04	100				
c	Naphthalin d8		1,04	98				
d	1-Chlorododecan		1,04	79				
e	Acenaphthen d10		2,60	-		Volumen Standard		
Nachgewiesene Substanzen								
Scan	RT (Min.)	µg/l (I.S. b/c/d)	Massen m/z (fett = Hauptfragment)	Name, Trivialname oder IUPAC		% Fit	CAS-Nr.	Bemerkungen
772	9,48	0,17 – 0,7 b	83,146,148	Benzene, 1,4-dichloro-		84	106-46-7	Terpenoid
1090	11,24	0,52 – 2,1 d	67,81,82	Cyclohexane, ethenyl		80	695-12-5	
1361	12,74	0,36 – 1,4 b	110,138	Phenol, 2-ethoxy-		87	94-71-3	
1609	14,12	0,07 – 0,3 d	67,82,140	unbekannt				
1868	15,55	0,31 – 1,2 b	123,125,158	4-Chloro-2-methylthiophenol		82	17178-01-7	
2130	17,00	0,23 – 0,9 b	161,163	Benzenamine, 2,3-dichloro-		85	608-27-5	
2153	17,13	0,10 – 0,4 d	109,152	unbekannt				
2192	17,35	0,05 – 0,2 c	144,173	unbekannt				
2395	18,47	0,37 – 1,5 b	107,135	Phenol, 4-(1,1-dimethylpropyl)-		90	80-46-6	
2423	18,63	0,30 – 1,2 d	124,152,180	unbekannt				
2446	18,75	0,18 – 0,7 d	98,116	unbekannt				ev. 5-Pentyl-1,3-Benzdiol, CAS 500-66-3 oder Isomer
2484	18,97	0,16 – 0,6 d	95	unbekannt				gesättigte Säure
2521	19,17	0,18 – 0,7 b	132,161,163	unbekannt				Hinweis auf Dichloranilin
2752	20,45	0,48 – 1,9 d	128,192,194	Sulfur		92	13798-23-7	
2769	20,54	0,27 – 1,1 b	91,138,167,173	unbekannt				
2786	20,64	0,18 – 0,7 b	119,174	unbekannt				
2802	20,73	0,48 – 1,9 d	123,137,180	unbekannt				ev. 1,1'-Biphenyl-2-amin CAS 90-41-5 oder Isomer Aromatische Verbindung, silyliert
2942	21,50	1,07 – 4,3 d	140,154	unbekannt				
2967	21,64	0,25 – 1,0 d	140,155	Methyprylon		87	125-64-4	
3106	22,41	0,32 – 1,3 d	168,169,205	unbekannt				
3134	22,57	0,82 – 3,3 b	121,151,208	unbekannt				
3164	22,73	0,57 – 2,3 d	43,101,171,245	(2,2,5,5-Tetramethyldihydro-1,3,4,6,8-pentaoxacyclopenta[a]inden-3a-yl)methanol		84	NA	
3223	23,06	0,11 – 0,4 b	90,91,106,131,171	Benzenesulfonamide, 2-methyl-		81	88-19-7	
3277	23,36	0,61 – 2,4 b	91,105,147	Benzene, (1,1-diethylpropyl)-		81	4170-84-7	
3293	23,45	0,26 – 1,0 b	189,204,206	unbekannt				
3356	23,80	0,39 – 1,6 b	91,155,171	N-p-toluenesulfonyl-l-threonine, benzyl ester		82	NA	
3416	24,13	0,31 – 1,2 d	125	unbekannt				aromatische, chlorierte Sulfonylverbindung
3456	24,35	0,14 – 0,6 d	164,207,235	unbekannt				
3535	24,79	0,25 – 1,0 d	93,125	unbekannt				
3615	25,23	0,27 – 1,1 d	43,59,259	2,2,5,5-Tetramethyldihydro-1,3,4,6,8-pentaoxacyclopenta[a]indene-3a-carboxylic acid		81	NA	
3672	25,55	0,15 – 0,6 d	150,155,212	unbekannt				

Auftraggeber
Projekt
Auftrag Nr.
Datum

HPC Harress Pickel Consult AG
U II "Kesslergrube", Grenzach-Wyhlen
A10-00306
09.04.2010

Anhang: **14**

Probenbezeichnung: KE 35				Int. Probennummer: M1002-01626					
Interne Standards									
Nr.	Name des Internen Standards (I.S.)		Konzentration (µg/l)	Wiederfindung (%)		Bemerkungen			
a	Anilin d5		1,04	10		Volumen Standard			
b	Nitrobenzol d5		1,04	100					
c	Naphthalin d8		1,04	98					
d	1-Chlorododecan		1,04	79					
e	Acenaphthen d10		2,60	-					
Nachgewiesene Substanzen									
Scan	RT (Min.)	µg/l (I.S. b/c/d)	Massen m/z (fett = Hauptfragment)	Name, Trivialname oder IUPAC	% Fit	CAS-Nr.	Bemerkungen		
3720	25,82	1,37 – 5,5 d	137,160,165	unbekannt			ev. 1-Phenyl-3methyl-4-hydroxy-4-(prop-2-yl)-2,5-dihydropyrazol-5-on (Wiley9) Terpenoid polyzyklischer, heterozyklischer Aromat		
3749	25,98	0,49 – 2,0 d	150,178,207	unbekannt					
3774	26,12	0,30 – 1,2 d	174,216	unbekannt					
3823	26,39	1,15 – 4,6 d	93,190,232	unbekannt					
3859	26,59	0,68 – 2,7 d	137,165,208	unbekannt	90	479-92-5			
4140	28,14	1,04 – 4,1 d	202	unbekannt					
4173	28,33	0,58 – 2,3 d	108,196	unbekannt					
4290	28,98	3,33 – 13,3 b	215,230	Propyphenazone					
4326	29,18	0,15 – 0,6 b	211	Benzothiazole, 2-phenyl-				81	883-93-2
4371	29,43	0,91 – 3,6 b	183	3-Dibenzofuranamine				84	4106-66-5
4405	29,61	0,68 – 2,7 b	183	3-Dibenzofuranamine				83	4106-66-5
4477	30,01	6,67 – 26,7 d	128,160,256	Cyclic octaatomic sulfur				89	10544-50-0
4542	30,37	0,18 – 0,7 d	169	unbekannt				91	719-59-5
4580	30,58	0,33 – 1,3 d	77,230,231	Methanone, (2-amino-5-chlorophenyl)phenyl-					
4604	30,72	0,29 – 1,2 d	165,181,210	unbekannt					
4704	31,27	0,36 – 1,4 d	219,253	unbekannt					
4874	32,21	0,09 – 0,4 d	91,135,162	unbekannt	83	111-06-8			
4906	32,39	0,50 – 2,0 d	56,239,257	Hexadecanoic acid, butyl ester					
4944	32,60	0,86 – 3,4 d	137,165,166	unbekannt					
5252	34,31	0,13 – 0,5 d	136,266,281	unbekannt					
5294	34,54	0,14 – 0,5 d	157,314	unbekannt	83	123-95-5			
5372	34,97	0,13 – 0,5 d	157,314	unbekannt					
5414	35,21	0,76 – 3,0 d	56,267,284	Octadecanoic acid, butyl ester					
5443	35,37	0,07 – 0,3 d	71,85,129	unbekannt					
5468	35,51	0,47 – 1,9 d	193	unbekannt	88	791-28-6			
5745	37,04	0,99 – 3,9 b	277,278	Triphenylphosphine oxide					
5974	38,31	0,13 – 0,5 d	255,256	unbekannt					
6190	39,51	0,20 – 0,8 d	113,185,243,359	unbekannt			zuckerähnlich		
6712	42,40	1,77 – 7,1 d	273,300,317	unbekannt					

Aufkonzentrierungsfaktor: 1200
Bestimmungsgrenze (IS Naphthalin): 0.05 µg/l

Auftraggeber
Projekt
Auftrag Nr.
Datum

HPC Harress Pickel Consult AG
U II "Kesslergrube", Grenzach-Wyhlen
A10-00306
09.04.2010

Anhang: **15**

Probenbezeichnung: S 3			Int. Probennummer: M1002-01627				
Interne Standards							
Nr.	Name des Internen Standards (I.S.)		Konzentration (µg/l)	Wiederfindung (%)		Bemerkungen	
a	Anilin d5		1,04	15			
b	Nitrobenzol d5		1,04	103			
c	Naphthalin d8		1,04	107			
d	1-Chlorododecan		1,04	76			
e	Acenaphthen d10		2,59	-		Volumen Standard	
Nachgewiesene Substanzen							
Scan	RT (Min.)	µg/l (I.S. b/c/d)	Massen m/z (fett = Basispeak)	Name, Trivialname oder IUPAC	% Fit	CAS-Nr.	Bemerkungen
4905	32,39	0,10 – 0,4 d	56,73,129,239,257	unbekannt			Fettsäureester; ev. Hexansäurebutylester, CAS 11-06-8

Aufkonzentrierungsfaktor: 690
Bestimmungsgrenze (IS Naphthalin): 0.05 µg/l

Auftraggeber
Projekt
Auftrag Nr.
Datum

HPC Harress Pickel Consult AG
U II "Kesslergrube", Grenzach-Wyhlen
A10-00306
09.04.2010

Anhang: **16**

Probenbezeichnung: KE 36					Int. Probennummer:		M1002-01628		
Interne Standards									
Nr.	Name des Internen Standards (I.S.)				Konzentration (µg/l)	Wiederfindung (%)		Bemerkungen	
a	Anilin d5				1,12	8			
b	Nitrobenzol d5				1,12	58			
c	Naphthalin d8				1,12	65			
d	1-Chlorododecan				1,12	60			
e	Acenaphthen d10				2,79	-			
Nachgewiesene Substanzen									
Scan	RT (Min.)	µg/l (I.S. b/c/d)			Massen m/z (fett = Basispeak)	Name, Trivialname oder IUPAC	% Fit	CAS-Nr.	Bemerkungen
1092	11,25	0,09	–	0,3 d	67,81,82	unbekannt	81	27509-65-5	substituiertes Cyclohexen
2869	21,10	0,08	–	0,3 d	195,196	Barbituric acid, 5-allyl-5-isopropyl-1,3-dimethyl-			
2940	21,49	1,49	–	6,0 d	140,154,170	unbekannt	82	125-64-4	Alkylbenzol mit Verzweigungen in Kette ev. Methylsulfonylbenzylchlorid
2964	21,63	0,10	–	0,4 d	140,155	Methyprylon			
3166	22,75	0,19	–	0,8 d	171,172,188	unbekannt			
3256	23,25	0,09	–	0,4 d	143,144,171,172,188	unbekannt			
3275	23,35	0,14	–	0,6 d		unbekannt			
3291	23,44	0,16	–	0,6 d	204,206	unbekannt	82	109-16-0	ev. 1-Phenyl-3-methyl-4-hydroxy-4-(prop-2-yl)2,5-dihydropyrazol-5-on (Wiley9) Terpenoid polyzyklisch, aromatisch Hinweis auf Fettsäureester Hinweis auf Fettsäureester
3416	24,13	0,08	–	0,3 d	125	unbekannt			
3532	24,78	0,06	–	0,3 d	93,125,135	unbekannt			
3719	25,81	0,30	–	1,2 d	137,165,208	unbekannt			
3819	26,37	0,33	–	1,3 d	93,190,232	unbekannt			
3857	26,58	0,35	–	1,4 d	137,165,208	unbekannt			
4137	28,13	0,37	–	1,5 d	201,202	unbekannt			
4179	28,36	0,12	–	0,5 d	74,87	unbekannt			
4217	28,57	0,21	–	0,8 d	55,69,97,148,236	unbekannt			
4403	29,60	0,15	–	0,6 d	155,183	unbekannt			
4540	30,36	0,23	–	0,9 d	142,169	unbekannt			
4773	31,65	0,25	–	1,0 d	69,88,97	unbekannt	82	109-16-0	Hnweis auf Fettsäureester ungesättigter Diester eines Polyethers
4808	31,85	0,27	–	1,1 d	69,113	2-Propenoic acid, 2-methyl-, 1,2-ethanedilybis(oxy-2,1-ethanediyl) ester			
4872	32,20	0,06	–	0,3 d	91,135,62	unbekannt	81	111-06-8	Hnweis auf Fettsäureester
4905	32,39	0,17	–	0,7 d	56,73,239,257,	Hexadecanoic acid, butyl ester			
5243	34,26	0,07	–	0,3 d	136,281	unbekannt			
5444	35,37	0,07	–	0,3 d	57,71,85	unbekannt			
5466	35,50	0,19	–	0,7 d	193	unbekannt			
5740	37,01	0,10	–	0,4 d	277	Triphenylphosphine oxide	86	791-28-6	verm. Polyzyklischer O-haltiger Aromat verm. Polyzyklischer O-haltiger Aromat
5972	38,30	0,12	–	0,5 d	255,256	unbekannt			
6183	39,47	0,08	–	0,3 d	180,320	unbekannt			

Auftraggeber
Projekt
Auftrag Nr.
Datum

HPC Harress Pickel Consult AG
U II "Kesslergrube", Grenzach-Wyhlen
A10-00306
09.04.2010

Anhang: **16**

Probenbezeichnung: KE 36				Int. Probennummer: M1002-01628			
Interne Standards							
Nr.	Name des Internen Standards (I.S.)	Konzentration (µg/l)	Wiederfindung (%)		Bemerkungen		
a	Anilin d5	1,12	8				
b	Nitrobenzol d5	1,12	58				
c	Naphthalin d8	1,12	65				
d	1-Chlorododecan	1,12	60				
e	Acenaphthen d10	2,79	-		Volumen Standard		
Nachgewiesene Substanzen							
Scan	RT (Min.)	µg/l (I.S. b/c/d)	Massen m/z (fett = Basispeak)	Name, Trivialname oder IUPAC	% Fit	CAS-Nr.	Bemerkungen
6702	42,35	0,96 – 3,8 d	300,301,317,318	unbekannt			

Aufkonzentrierungsfaktor: 600
Bestimmungsgrenze (IS Naphthalin): 0.05 µg/l

Auftraggeber
Projekt
Auftrag Nr.
Datum

HPC Harress Pickel Consult AG
U II "Kesslergrube", Grenzach-Wyhlen
A10-00306
09.04.2010

Anhang: **17**

Probenbezeichnung: Br 49			Int. Probennummer: M1002-01629				
Interne Standards							
Nr.	Name des Internen Standards (I.S.)	Konzentration (µg/l)	Wiederfindung (%)		Bemerkungen		
a	Anilin d5	1,05	18				
b	Nitrobenzol d5	1,05	82				
c	Naphthalin d8	1,05	82				
d	1-Chlorododecan	1,05	69				
e	Acenaphthen d10	2,62	-		Volumen Standard		
Nachgewiesene Substanzen							
Scan	RT (Min.)	µg/l (I.S. b/c/d)	Massen m/z (fett = Basispeak)	Name, Trivialname oder IUPAC	% Fit	CAS-Nr.	Bemerkungen

Aufkonzentrierungsfaktor: 640
Bestimmungsgrenze (IS Naphthalin): 0.05 µg/l

Auftraggeber
Projekt
Auftrag Nr.
Datum

HPC Harress Pickel Consult AG
U II "Kesslergrube", Grenzach-Wyhlen
A10-00306
18.10.2010

Anhang: **18**

Probenbezeichnung: KE 29				Int. Probennummer: M1002-01630			
Interne Standards							
Nr.	Name des Internen Standards (I.S.)		Konzentration (µg/l)	Wiederfindung (%)		Bemerkungen	
a	Anilin d5		13,30	19			
b	Nitrobenzol d5		13,30	85			
c	Naphthalin d8		13,30	81			
d	1-Chlorododecan		13,30	57			
e	Acenaphthen d10		33,26	-			
Nachgewiesene Substanzen							
Scan	RT (Min.)	µg/l (I.S. b/c/d)	Massen m/z (fett = Basispeak)	Name, Trivialname oder IUPAC	% Fit	CAS-Nr.	Bemerkungen
337	7,06	3,8 – 15,3 d	43	Butanoic acid, 3-oxo-, ethyl ester	88	141-97-9	
772	9,48	11,7 – 46,8 d	43,83,141	unbekannt			
1091	11,24	23,4 – 93,4 d	67,81,82	unbekannt			
1363	12,75	28,4 – 113,7 b	118	Phenol, 2-ethoxy-	89	94-71-3	Hinweis auf substituiertes Cyclohexen
1941	15,96	4,1 – 16,4 b	134	Benzenamine, N,N,3-trimethyl-	83	121-72-2	
2400	18,50	15,4 – 61,7 b	135	Phenol, 4-(1,1-dimethylpropyl)-	92	80-46-6	
2783	20,62	205,0 – 820,1 d	122,138,167	unbekannt			
3107	22,42	11,0 – 44,0 d	169,205,245	unbekannt			
3139	22,60	4,5 – 18,0 b	181	Pyrrole-3-carboxylic acid, 4-formyl-5-methyl-, ethyl ester	83	332414-41-2	3-Ethoxycarbonyl-2,5-Dimethylpyrrol (Wiley9)
3281	23,38	8,4 – 33,7 b	91	Benzene, (1,1-diethylpropyl)-	83	4170-84-7	
3438	24,25	8,9 – 35,6 b	259	2,2,7,7-Tetramethyl-tetrahydro-bis[1,3]dioxolo[4,5-b;4',5'-d]pyran-3a-carboxylic acid	88	NA	
3531	24,77	7,9 – 31,4 d	43,59,71,303	unbekannt			
3642	25,38	52,3 – 209,3 d	134,223	unbekannt			
3745	25,95	13,1 – 52,5 d	150,195	unbekannt			
3758	26,03	7,6 – 30,3 d	142,206,222	unbekannt			
3776	26,13	13,2 – 52,6 d	174,216	unbekannt			
3945	27,06	59,3 – 237,1 d	136,154,182	unbekannt			
3960	27,15	8,1 – 32,5 d	135,181,210	unbekannt			
4058	27,69	8,7 – 34,9 b	188	Antipyrine	89	60-80-0	
4145	28,17	40,7 – 162,8 d	77,110,202	unbekannt			
4476	30,01	12,6 – 50,5 d	255	Cyclic octaatomic sulfur	90	10544-50-0	
4843	32,04	26,9 – 107,8 d	73	Octadecanoic acid	88	57-11-4	
5413	35,20	8,0 – 32,1 d	135,161,207	unbekannt			
5468	35,51	16,6 – 66,5 d	193,239,323	unbekannt			
5516	35,77	15,2 – 60,6 d	164,178,206	unbekannt			
5975	38,32	9,4 – 37,5 d	226,255	unbekannt			
6115	39,09	7,7 – 30,9 d	213,257,332	unbekannt			
6369	40,50	14,4 – 57,5 d	213,240,257,332	unbekannt			

Auftraggeber
Projekt
Auftrag Nr.
Datum

HPC Harress Pickel Consult AG
U II "Kesslergrube", Grenzach-Wyhlen
A10-00306
18.10.2010

Anhang: **18**

Probenbezeichnung: KE 29				Int. Probennummer: M1002-01630			
Interne Standards							
Nr.	Name des Internen Standards (I.S.)		Konzentration (µg/l)	Wiederfindung (%)		Bemerkungen	
a	Anilin d5		13,30	19			
b	Nitrobenzol d5		13,30	85			
c	Naphthalin d8		13,30	81			
d	1-Chlorododecan		13,30	57			
e	Acenaphthen d10		33,26	-			
Nachgewiesene Substanzen							
Scan	RT (Min.)	µg/l (I.S. b/c/d)	Massen m/z (fett = Basispeak)	Name, Trivialname oder IUPAC	% Fit	CAS-Nr.	Bemerkungen
2487	18,98	6,0 – 24,0 d	95 43,137,182	unbekannt			
3705	25,73	4,9 – 19,7 d	150 149,195,206	unbekannt			
3826	26,40	5,5 – 21,9 d	232 43,93,190	unbekannt			
3862	26,60	5,5 – 21,8 d	246 173,201,217	unbekannt			
3978	27,25	6,5 – 26,1 d	221 138,152,178	unbekannt			
4082	27,82	5,2 – 20,6 d	165 138,164,210	unbekannt			
4446	29,84	6,0 – 24,2 d	214 140,168,168	unbekannt			
4949	32,63	5,9 – 23,4 d	165 137,166,193	unbekannt			
4977	32,78	6,9 – 27,8 d	165 137,166,193	unbekannt			
4992	32,87	6,6 – 26,4 d	165 137,166,193	unbekannt			
6259	39,89	6,8 – 27,3 d	164 139,238,294	unbekannt			

Aufkonzentrierungsfaktor: 75
Bestimmungsgrenze (IS Naphthalin): 1.5 µg/l

Auftraggeber
Projekt
Auftrag Nr.
Datum

HPC Harress Pickel Consult AG
U II "Kesslergrube", Grenzach-Wyhlen
A10-00306
18.10.2010

Anhang: **19**

Probenbezeichnung: KE 30				Int. Probennummer: M1002-01631			
Interne Standards							
Nr.	Name des Internen Standards (I.S.)		Konzentration (µg/l)	Wiederfindung (%)		Bemerkungen	
a	Anilin d5		1,06	16			
b	Nitrobenzol d5		1,06	85			
c	Naphthalin d8		1,06	73			
d	1-Chlorododecan		1,06	81			
e	Acenaphthen d10		2,65	-			
Nachgewiesene Substanzen							
Scan	RT (Min.)	µg/l (I.S. b/c/d)	Massen m/z (fett = Hauptfragment)	Name, Trivialname oder IUPAC	% Fit	CAS-Nr.	Bemerkungen
318	6,96	0,41 – 1,6 d	91	Benzene, 1-chloro-3-methyl-	85	108-41-8	alkylsubstituiertes Cyclohexen
654	8,82	0,23 – 0,9 d	146	Benzene, 1,2-dichloro-	88	95-50-1	
772	9,47	2,00 – 8,0 d	83	unbekannt			
943	10,42	0,26 – 1,0 d	106	Aniline, N-methyl-	88	100-61-8	
1092	11,25	3,59 – 14,4 d	81				
1244	12,09	0,26 – 1,0 d	127	p-Chloroaniline	88	106-47-8	alkylsubstituiertes Cyclohexen
1362	12,74	9,75 – 39,0 d	110	Phenol, 2-ethoxy-	89	94-71-3	
1572	13,91	0,33 – 1,3 d	127	p-Chloroaniline	87	106-47-8	
1586	13,99	0,17 – 0,7 d	127	p-Chloroaniline	87	106-47-8	
1809	15,22	1,54 – 6,2 d	152	2-Ethoxy-4-methylphenol	92	2563-07-7	
1868	15,55	0,19 – 0,8 d	158	4-Chloro-2-methylthiophenol	82	17178-01-7	
1906	15,76	0,49 – 2,0 d	148	4,7-Methano-5H-inden-5-one, 3,3a,4,6,7,7a-hexahydro-	81	14888-58-5	
1967	16,10	0,76 – 3,0 d	141	Benzenamine, 3-chloro-2-methyl-	91	87-60-5	
1997	16,26	0,81 – 3,2 d	141	Benzenamine, 4-chloro-2-methyl-	87	95-69-2	
2130	17,00	0,63 – 2,5 d	161	Benzenamine, 3,5-dichloro-	90	626-43-7	
2358	18,27	0,18 – 0,7 d	77	Sulfone, methyl phenyl	84	3112-85-4	
2397	18,48	8,32 – 33,3 d	135	Phenol, 4-(1,1-dimethylpropyl)-	94	80-46-6	
2483	18,96	1,23 – 4,9 d	95	unbekannt			
2521	19,17	0,25 – 1,0 d	161	Benzenamine, 2,3-dichloro-	86	608-27-5	
2585	19,52	0,18 – 0,7 d	107	Isobutyramide, N-methyl-N-phenyl-	86	NA	
2753	20,45	0,20 – 0,8 d	192	Sulfur	88	13798-23-7	
2780	20,60	8,72 – 34,9 d	138	unbekannt			
2809	20,76	0,80 – 3,2 d	92	unbekannt			
2907	21,31	11,92 – 47,7 d	143	1-Naphthalenamine	92	134-32-7	
2940	21,49	1,07 – 4,3 d	111	unbekannt			
3106	22,41	2,80 – 11,2 d	169	[1,1'-Biphenyl]-2-amine	82	90-41-5	
3164	22,73	1,88 – 7,5 d	245	(2,2,5,5-Tetramethyl-tetrahydro-1,3,4,6,8-pentaoxa-cyclopenta[a]inden-8a-yl)-methanol	90	NA	
3284	23,40	5,46 – 21,8 d	91	Benzene, (1,1-diethylpropyl)-	86	4170-84-7	alkylsubstituiertes Cyclohexen
3372	23,89	1,14 – 4,6 d	91	Benzenesulfonamide, 4-methyl-	88	70-55-3	
3406	24,07	0,92 – 3,7 d	144	unbekannt			
3438	24,25	0,59 – 2,4 d	259	2,2,7,7-Tetramethyl-tetrahydro-bis[1,3]dioxolo[4,5-b;4',5'-d]pyran-3a-carboxylic acid	89	NA	
3532	24,77	1,13 – 4,5 d	59	unbekannt			alkylsubstituiertes Cyclohexen
3640	25,37	1,60 – 6,4 d	134	unbekannt			
3776	26,13	8,93 – 35,7 d	174	unbekannt			
3804	26,28	0,79 – 3,2 d	150	unbekannt			
3833	26,44	3,17 – 12,7 d	232	unbekannt			
3863	26,61	0,65 – 2,6 d	245	unbekannt			
3962	27,16	4,85 – 19,4 d	182	unbekannt			
3977	27,24	0,61 – 2,5 d	181	unbekannt			

Auftraggeber
Projekt
Auftrag Nr.
Datum

HPC Harress Pickel Consult AG
U II "Kesslergrube", Grenzach-Wyhlen
A10-00306
18.10.2010

Anhang: **19**

Probenbezeichnung: **KE 30** Int. Probennummer: **M1002-01631**

Interne Standards				
Nr.	Name des Internen Standards (I.S.)	Konzentration (µg/l)	Wiederfindung (%)	Bemerkungen
a	Anilin d5	1,06	16	
b	Nitrobenzol d5	1,06	85	
c	Naphthalin d8	1,06	73	
d	1-Chlorododecan	1,06	81	
e	Acenaphthen d10	2,65	-	

Nachgewiesene Substanzen							
Scan	RT (Min.)	µg/l (I.S. b/c/d)	Massen m/z (fett = Hauptfragment)	Name, Trivialname oder IUPAC	% Fit	CAS-Nr.	Bemerkungen
4015	27,45	3,95 – 15,8 d	189	Glutethimide	92	77-21-4	
4067	27,74	2,88 – 11,5 d	188	Antipyrine	92	60-80-0	
4156	28,23	18,08 – 72,3 d	202	unbekannt			
4295	29,00	4,06 – 16,2 d	215	Propyphenazone	91	479-92-5	
4388	29,52	0,74 – 3,0 d	263	3,5-di-tert-Butyl-4-hydroxyphenylpropionic acid	89	20170-32-5	
4426	29,73	0,51 – 2,1 d	281	unbekannt			
4477	30,01	2,69 – 10,8 d	255	Cyclic octaatomic sulfur	93	10544-50-0	
4550	30,42	1,67 – 6,7 d	169	unbekannt			
4634	30,88	1,82 – 7,3 d	193	unbekannt			
4711	31,31	0,66 – 2,6 d	167	unbekannt			
4777	31,67	0,88 – 3,5 d	142	unbekannt			
4794	31,77	0,53 – 2,1 d	144	unbekannt			
4840	32,02	0,74 – 3,0 d	193	unbekannt			
4878	32,23	0,62 – 2,5 d	91	unbekannt			
4987	32,84	1,71 – 6,8 d	144	unbekannt			
5042	33,14	1,60 – 6,4 d	255	unbekannt			
5291	34,52	3,39 – 13,6 d	281	unbekannt			
5432	35,30	0,68 – 2,7 d	253	unbekannt			
5472	35,53	2,44 – 9,8 d	193	unbekannt			
5496	35,66	0,59 – 2,4 d	177	unbekannt			
5565	36,04	1,88 – 7,5 d	178	unbekannt			
5595	36,21	0,96 – 3,8 d	178	unbekannt			
5609	36,29	0,72 – 2,9 d	178	unbekannt			
5631	36,41	0,59 – 2,4 d	99	unbekannt			
5757	37,11	0,63 – 2,5 d	277	Triphenylphosphine oxide	89	791-28-6	
5915	37,98	0,34 – 1,4 d	286	[1,1'-Binaphthalene]-2,2'-diol	83	602-09-5	
6038	38,66	0,73 – 2,9 d	199	unbekannt			

Auftraggeber
Projekt
Auftrag Nr.
Datum

HPC Harress Pickel Consult AG
U II "Kesslergrube", Grenzach-Wyhlen
A10-00306
18.10.2010

Anhang: **19**

Probenbezeichnung: **KE 30** Int. Probennummer: **M1002-01631**

Interne Standards				
Nr.	Name des Internen Standards (I.S.)	Konzentration (µg/l)	Wiederfindung (%)	Bemerkungen
a	Anilin d5	1,06	16	
b	Nitrobenzol d5	1,06	85	
c	Naphthalin d8	1,06	73	
d	1-Chlorododecan	1,06	81	
e	Acenaphthen d10	2,65	-	

Nachgewiesene Substanzen									
Scan	RT (Min.)	µg/l (I.S. b/c/d)			Massen m/z (fett = Hauptfragment)	Name, Trivialname oder IUPAC	% Fit	CAS-Nr.	Bemerkungen
2191	17,34	0,39	–	1,5 d	134 106,133,179	unbekannt			
2259	17,72	0,20	–	0,8 d	135 91,107,164	unbekannt			
2451	18,78	0,24	–	1,0 d	108 106,124,153	unbekannt			
2837	20,92	0,23	–	0,9 d	205 191,206,220	unbekannt			
2970	21,66	0,34	–	1,4 d	110 111,140,155	unbekannt			
3044	22,07	0,47	–	1,9 d	110 111,138,183	unbekannt			
3217	23,03	0,20	–	0,8 d	135 85,107,133	unbekannt			
3457	24,36	0,45	–	1,8 d	137 108,136,207	unbekannt			
3514	24,67	0,25	–	1,0 d	129 103,116,171	unbekannt			
3554	24,89	0,32	–	1,3 d	188 43,105,135	unbekannt			
3570	24,98	0,24	–	1,0 d	154 137,161,210	unbekannt			
3673	25,55	0,34	–	1,4 d	155 91,176,212	unbekannt			
3716	25,79	0,29	–	1,2 d	144 145,150,160	unbekannt			
3908	26,86	0,35	–	1,4 d	118 179,209,224	unbekannt			
4177	28,35	0,20	–	0,8 d	108 43,196,202	unbekannt			
4201	28,48	0,42	–	1,7 d	217 189,216,290	unbekannt			
4245	28,72	0,23	–	0,9 d	135 161,162,185	unbekannt			
4448	29,85	0,18	–	0,7 d	214 140,168,169	unbekannt			
4571	30,53	0,29	–	1,2 d	150 148,178,221	unbekannt			
4666	31,06	0,28	–	1,1 d	144 130,145,195	unbekannt			
4923	32,48	0,28	–	1,1 d	274 178,204,206	unbekannt			
5090	33,41	0,46	–	1,8 d	112 137,165,193	unbekannt			
5227	34,17	0,35	–	1,4 d	165 137,166,193	unbekannt			
5244	34,26	0,33	–	1,3 d	165 137,166,193	unbekannt			
5975	38,31	0,42	–	1,7 d	178 160,164,206	unbekannt			
6120	39,12	0,42	–	1,7 d	213 214,257,259	unbekannt			
6379	40,55	0,42	–	1,7 d	213 212,240,332	unbekannt			
6919	43,55	0,17	–	0,7 d	71 43,57,85	unbekannt			
7080	44,44	0,21	–	0,8 d	71 57,85,207	unbekannt			

Aufkonzentrierungsfaktor: 630
Bestimmungsgrenze (IS Naphthalin): 0.2 µg/l

Auftraggeber
Projekt
Auftrag Nr.
Datum

HPC Harress Pickel Consult AG
U II "Kesslergrube", Grenzach-Wyhlen
A10-00306
12.05.2010

Anhang: **20**

Probenbezeichnung: KE 38				Int. Probennummer: M1002-01632			
Interne Standards							
Nr.	Name des Internen Standards (I.S.)	Konzentration (µg/l)	Wiederfindung (%)		Bemerkungen		
a	Anilin d5	27,78	23				
b	Nitrobenzol d5	27,78	65				
c	Naphthalin d8	27,78	70				
d	1-Chlorododecan	27,78	50				
e	Acenaphthen d10	69,44	-				
Nachgewiesene Substanzen							
Scan	RT (Min.)	µg/l (I.S. a/b/c/d)	Massen m/z (fett = Basispeak)	Name, Trivialname oder IUPAC	% Fit	CAS-Nr.	Bemerkungen
474	7,82	20 – 79 a	93	Aniline	89	62-53-3	Co-elution
975	10,60	10,3 – 41,1 b	106	p-Aminotoluene	91	106-49-0	
1362	12,75	260,0 – 1040 b	110	Phenol, 2-ethoxy-	90	94-71-3	
1452	13,24	5,7 – 23,0 b	121	Benzenamine, 2,5-dimethyl-	86	95-78-3	
1577	13,94	12,2 – 48,9 b	127	p-Chloroaniline	88	106-47-8	
1812	15,24	27,8 – 111,0 b	152	2-Ethoxy-4-methylphenol	90	2563-07-7	
1835	15,37	8,1 – 32,3 b	135	Benzenamine, 2,4,6-trimethyl-	87	88-05-1	
2001	16,29	29,4 – 117,6 b	141	Benzenamine, 4-chloro-2-methyl-	90	95-69-2	
2137	17,04	4,1 – 16,4 b	161	Benzenamine, 3,5-dichloro-	89	626-43-7	
2488	18,99	24,8 – 99,2 d	95	unbekannt			
2839	20,93	4,2 – 16,6 d	205,220	unbekannt			
3109	22,43	10,4 – 41,8 b	169	2-Methyl-3-phenylpyridine	86	3256-89-1	
3193	22,90	4,1 – 16,4 b	159	1-Phenyl-1H-pyrazol-3-amine	93	1128-56-9	
3234	23,12	7,5 – 30,2 b	90	Benzenesulfonamide, 2-methyl-	82	88-19-7	
3281	23,38	5,5 – 21,9 b	91	Benzene, (1,1-diethylpropyl)-	82	4170-84-7	
3371	23,88	8,9 – 35,7 b	91	Benzenesulfonamide, 4-methyl-	86	70-55-3	
3408	24,09	3,7 – 14,9 d	130,144	unbekannt			
3459	24,37	5,6 – 22,5 d	109,164,207,235	unbekannt			
3531	24,77	3,8 – 15,0 d	59,135,303	unbekannt			
3776	26,13	34,5 – 138,1 d	77,174,216	unbekannt			
3824	26,39	32,5 – 130,0 d	93,190,232	unbekannt			
4145	28,17	4,9 – 19,8 d	77,110,202	unbekannt			
4291	28,98	57,2 – 228,9 b	149	Propyphenazone	90	479-92-5	
4477	30,01	41,9 – 167,7 d	255	Cyclic octaatomic sulfur	90	10544-50-0	
4547	30,40	8,3 – 33,3 d	142,169,223	unbekannt			
4840	32,02	7,1 – 28,2 d	73	Octadecanoic acid	82	57-11-4	
5038	33,12	9,0 – 36,2 d	148,212,255	unbekannt			
5975	38,32	48,1 – 192,6 d	255	unbekannt			

Aufkonzentrierungsfaktor:

36

Bestimmungsgrenze (IS Naphthalin):

1.5 µg/l

Auftraggeber
Projekt
Auftrag Nr.
Bericht

HPC Harress Pickel Consult AG
U II "Kesslergrube", Grenzach-Wyhlen
A10-00306
09.04.2010

Anhang: **21**

Probenbezeichnung: KE 21				Int. Probennummer: M1002-01633			
Interne Standards							
Nr.	Name des Internen Standards (I.S.)		Konzentration (µg/l)	Wiederfindung (%)		Bemerkungen	
a	Anilin d5		1,06	26			
b	Nitrobenzol d5		1,06	84			
c	Naphthalin d8		1,06	77			
d	1-Chlorododecan		1,06	127			
e	Acenaphthen d10		2,65	-		Volumen Standard	
Nachgewiesene Substanzen							
Scan	RT (Min.)	µg/l (I.S. b/c/d)	Massen m/z (fett = Basispeak)	Name, Trivialname oder IUPAC	% Fit	CAS-Nr.	Bemerkungen
317	6,95	1,33 – 5,3 b	91	Benzene, 1-chloro-2-methyl-	81	95-49-8	ev. Dimethyl-(2-furyl)pyridin, CAS 78563-72-1, oder Isomer
615	8,61	2,25 – 9,0 b	146	Benzene, 1,2-dichloro-	92	95-50-1	
652	8,81	1,48 – 5,9 b	146	Benzene, 1,4-dichloro-	92	106-46-7	
770	9,46	1,81 – 7,2 b	146	Benzene, 1,4-dichloro-	92	106-46-7	
1005	10,77	0,53 – 2,1 b	106	p-Aminotoluene	91	106-49-0	
1203	11,86	0,71 – 2,8 b	125	Benzene, 1,3-dichloro-5-methyl-	90	25186-47-4	
1251	12,13	1,18 – 4,7 d	155	Triethyl phosphate	85	78-40-0	
1361	12,74	5,74 – 23,0 b	110	Phenol, 2-ethoxy-	89	94-71-3	
1572	13,91	6,63 – 26,5 b	127	m-Chloroaniline	93	108-42-9	
1810	15,23	1,18 – 4,7 b	152	2-Ethoxy-4-methylphenol	88	2563-07-7	
1868	15,55	0,56 – 2,2 b	158	4-Chloro-2-methylthiophenol	83	17178-01-7	
1967	16,10	3,68 – 14,7 b	141	Benzenamine, 3-chloro-2-methyl-	91	87-60-5	
1997	16,27	3,41 – 13,6 b	141	Benzenamine, 5-chloro-2-methyl-	91	95-79-4	
2130	17,00	2,73 – 10,9 b	161	Benzenamine, 2,5-dichloro-	92	95-82-9	
2192	17,35	3,74 – 14,9 b	144,173	unbekannt			
2321	18,06	0,12 – 0,5 c	162	Naphthalene, 2-chloro-	88	91-58-7	Isomer zu 1-Chlor-4-(methylsulfonyl)benzol, CAS 98-57-7
2397	18,48	5,37 – 21,5 b	135	Phenol, 4-(1,1-dimethylpropyl)-	93	80-46-6	
2521	19,17	3,52 – 14,1 b	161	Benzenamine, 3,5-dichloro-	93	626-43-7	
2754	20,46	0,16 – 0,6 d	192	Sulfur	94	13798-23-7	
2905	21,30	4,41 – 17,6 c	143	1-Naphthalenamine	90	134-32-7	
2939	21,49	1,34 – 5,4 b	111,175,190	unbekannt			
2971	21,66	1,26 – 5,0 b	140	Methyprylon	91	125-64-4	
3107	22,42	2,33 – 9,3 b	169	[1,1'-Biphenyl]-2-amine	83	90-41-5	
3213	23,01	0,25 – 1,0 b	169	2-p-Tolylpyridine	90	937735,00	
3282	23,39	3,59 – 14,4 b	91	Benzene, (1,1-diethylpropyl)-	85	4170-84-7	
3366	23,85	1,40 – 5,6 b	91	Benzenesulfonamide, 4-methyl-	87	70-55-3	
3407	24,08	0,86 – 3,5 c	130,144,169	unbekannt			polyzyklischer Aromat, O-haltig
3437	24,25	0,17 – 0,7 d	259	2,2,7,7-Tetramethyl-tetrahydro-bis[1,3]dioxolo[4,5-b;4',5'-d]pyran-3a-carboxylic acid	81	NA	
3674	25,56	0,42 – 1,7 b	155	Benzenesulfonamide, N-(1,1-dimethylethyl)-4-methyl-	81	2849-81-2	Koelution
3776	26,13	15,42 – 61,7 b	142,144,174	unbekannt			polyzyklischer Aromat, O-haltig ev. 1-Phenyl-3-methyl-4-hydroxy-4-(prop-2-yl)2,5-dihydropyrazol-5-on (Wiley9)
3829	26,42	5,63 – 22,5 b	93,190,232	unbekannt			
3881	26,71	1,87 – 7,5 d	216	Acetic acid, (2-phenylcyclohexylidene)-	81	19910-00-0	
3902	26,83	0,68 – 2,7 d	129,171,216	unbekannt			
3947	27,08	1,61 – 6,4 b	136,182	unbekannt			
4014	27,45	3,43 – 13,7 b	189	Glutethimide	89	77-21-4	
4063	27,72	1,95 – 7,8 b	188	Antipyrine	91	60-80-0	

Auftraggeber
Projekt
Auftrag Nr.
Bericht

HPC Harress Pickel Consult AG
U II "Kesslergrube", Grenzach-Wyhlen
A10-00306
09.04.2010

Anhang: **21**

Probenbezeichnung: **KE 21** Int. Probennummer: **M1002-01633**

Interne Standards				
Nr.	Name des Internen Standards (I.S.)	Konzentration (µg/l)	Wiederfindung (%)	Bemerkungen
a	Anilin d5	1,06	26	
b	Nitrobenzol d5	1,06	84	
c	Naphthalin d8	1,06	77	
d	1-Chlorododecan	1,06	127	
e	Acenaphthen d10	2,65	-	
				Volumen Standard

Nachgewiesene Substanzen							
Scan	RT (Min.)	µg/l (I.S. b/c/d)	Massen m/z (fett = Basispeak)	Name, Trivialname oder IUPAC	% Fit	CAS-Nr.	Bemerkungen
4153	28,22	18,09 – 72,3 b	110,202	unbekannt			heterozyklischer, polyzyklischer Aroamt
4296	29,01	7,56 – 30,2 b	215	Propyphenazone	93	479-92-5	
4377	29,46	0,31 – 1,2 d	138	Methanone, bis(3-chlorophenyl)-	93	7094-34-0	
4477	30,01	3,06 – 12,3 d	256	Cyclic octaatomic sulfur	92	10544-50-0	
4550	30,42	2,40 – 9,6 b	169	2-2(Quinoylmethyleneamino)ethanol	81	5971-05-1	
4581	30,59	0,80 – 3,2 b	230	Benz[c]isoxazole, 1,3-dihydro-5-chloro-3-phenyl-	86	NA	
4607	30,73	1,17 – 4,7 b	165,181,210	unbekannt			
4662	31,04	1,37 – 5,5 d	221	Heptabarbital	89	509-86-4	
4776	31,67	1,31 – 5,3 b	142,169	unbekannt			
4986	32,83	4,21 – 16,8 b	144,145,166	unbekannt			
5033	33,09	5,64 – 22,6 b	159	Benzene, 1,1'-sulfonylbis[4-chloro-	90	80-07-9	
5757	37,11	1,37 – 5,5 b	277	Triphenylphosphine oxide	90	791-28-6	
5914	37,98	0,34 – 1,4 c	286	[1,1'-Binaphthalene]-2,2'-diol	88	602-09-5	

Summe unbekannte Substanzen (je zwischen 0.2-1 µg/l)		
Anzahl	je µg/l (I.S. d)	Bemerkung
27	7,90 – 31,6 d	

Aufkonzentrierungsfaktor: 670
Bestimmungsgrenze (IS Naphthalin): 0.2 µg/l

Auftraggeber
Projekt
Auftrag Nr.
Datum

HPC Harress Pickel Consult AG
U II "Kesslergrube", Grenzach-Wyhlen
A10-00306
17.05.2010

Anhang: **22**

Probenbezeichnung: **KE 40** Int. Probennummer: **M1002-01634**

Interne Standards				
Nr.	Name des Internen Standards (I.S.)	Konzentration (µg/l)	Wiederfindung (%)	Bemerkungen
a	Anilin d5	1,06	11	
b	Nitrobenzol d5	1,06	64	
c	Naphthalin d8	1,06	74	
d	1-Chlorododecan	1,06	73	
e	Acenaphthen d10	2,66	-	

Nachgewiesene Substanzen							
Scan	RT (Min.)	µg/l (I.S. b/c/d)	Massen m/z (fett = Basispeak)	Name, Trivialname oder IUPAC	% Fit	CAS-Nr.	Bemerkungen
772	9,47	3,24 – 13,0 d	83,141	unbekannt			
1091	11,24	2,77 – 11,1 d	81	Cyclopropane, (2-methylenbutyl)-	80	74685-56-6	Ein substituiertes Cyclohexen
1604	14,09	1,59 – 6,3 d	67,82,141	unbekannt			
2194	17,36	1,47 – 5,9 b	105	1(3H)-Isobenzofuranone	83	87-41-2	
2387	18,43	1,77 – 7,1 d	109,152	unbekannt			
2483	18,96	1,28 – 5,1 d	95	unbekannt			
2771	20,56	2,74 – 11,0 d	122,138,167	unbekannt			3-Ethoxycarbonyl-2,5-dimethylpyrrol (wiley9) oder Isomer, F/RF 82/99%
2942	21,50	0,81 – 3,2 d	106,177	unbekannt			
3282	23,39	2,34 – 9,4 b	91	Benzene, (1,1-diethylpropyl)-	83	4170-84-7	
3366	23,85	0,89 – 3,5 b	91	Benzenesulfonamide, 4-methyl-	86	70-55-3	
3441	24,27	6,87 – 27,5 d	259	2,2,7,7-Tetramethyl-tetrahydro-bis[1,3]dioxolo[4,5-b;4',5'-d]pyran-3a-carboxylic acid	93	NA	
3459	24,37	1,09 – 4,3 d	207,208,235	unbekannt			
3756	26,02	2,09 – 8,4 d	134,150,195	unbekannt			
3828	26,41	5,47 – 21,9 d	150,195,232	unbekannt			
3863	26,61	3,47 – 13,9 d	173,246	unbekannt			
3906	26,85	1,57 – 6,3 d	94,152,224	unbekannt			
3956	27,12	1,59 – 6,3 d	135,181,210	unbekannt			
4081	27,82	1,09 – 4,4 d	137,183,198	unbekannt			
4115	28,01	0,91 – 3,7 d	59,71,317	unbekannt			
4145	28,17	5,61 – 22,5 d	202	unbekannt			
4201	28,48	0,98 – 3,9 d	216,217,290	unbekannt			
4294	29,00	4,89 – 19,5 b	215	Propyphenazone	93	479-92-5	
4466	29,95	0,74 – 3,0 b	256	i-Propyl hexadecanoate	90	NA	
4548	30,41	1,83 – 7,3 b	169	2-[2-Quinolylmethyleneamino]ethanol	80	5971-05-1	Oder a,a-Bis(2-cyanoethyl)benzylcyanid (wiley9), F/RF 76/99%
4833	31,99	2,10 – 8,4 d	193	unbekannt			
5257	34,34	0,91 – 3,7 d	136,209,236,281	unbekannt			
5292	34,53	1,28 – 5,1 d	193,249,323,396	unbekannt			
5474	35,54	10,81 – 43,2 d	193	unbekannt			
5558	36,00	1,94 – 7,7 d	164,178,206	unbekannt			
5975	38,32	0,77 – 3,1 d	255,256	unbekannt			
6748	42,60	3,63 – 14,5 d	300,317	unbekannt			

Aufkonzentrierungsfaktor:

780

Bestimmungsgrenze (IS Naphthalin):

0.5 µg/l

Auftraggeber
Projekt
Auftrag Nr.
Datum

HPC Harress Pickel Consult AG
U II "Kesslergrube", Grenzach-Wyhlen
A10-00306
15.04.2010

Anhang: **23**

Probenbezeichnung: **KE 33** Int. Probennummer: **M1002-01635**

Interne Standards				
Nr.	Name des Internen Standards (I.S.)	Konzentration (µg/l)	Wiederfindung (%)	Bemerkungen
a	Anilin d5	1,06	20	
b	Nitrobenzol d5	1,06	74	
c	Naphthalin d8	1,06	86	
d	1-Chlorododecan	1,06	130	
e	Acenaphthen d10	2,65	-	Volumen Standard

Nachgewiesene Substanzen							
Scan	RT (Min.)	µg/l (I.S. b/c/d)	Massen m/z (fett = Basispeak)	Name, Trivialname oder IUPAC	% Fit	CAS-Nr.	Bemerkungen
615	8,61	0,33 – 1,3 b	146	Benzene, 1,3-dichloro	91	541-73-1	
653	8,82	0,33 – 1,3 b	146	Benzene, 1,2-dichloro	91	95-50-1	
772	9,48	0,52 – 2,1 b	146	Benzene, 1,4-dichloro-	87	106-46-7	Interferenz m/z 141. Ok, oder isomer
1091	11,24	0,84 – 3,4 b	81	Spiro[2.5]octane	81	185-65-9	oder substituiertes Cyclohexen
1244	12,09	8,88 – 35,5 b	155	Triethyl phosphate	92	78-40-0	
1362	12,75	0,88 – 3,5 b	110	Phenol, 2-ethoxy-	86	94-71-3	
1572	13,91	0,57 – 2,3 b	127	p-Chloroaniline	91	106-47-8	
1967	16,10	0,53 – 2,1 b	141	Benzenamine, 3-chloro-2-methyl-	81	87-60-5	
1986							Tert-Butylphenol oder Isomer
1997	16,27	0,70 – 2,8 b	141	Benzenamine, 3-chloro-2-methyl-	87	87-60-5	
2129	17,00	0,62 – 2,5 b	161	Benzenamine, 2,3-dichloro-	88	608-27-5	
2152	17,13	0,57 – 2,3 b	109	2-Butanoyl-5-methylfuran	83	90673-55-5	Zu viele Möglichkeiten, nicht identifizierbar
2191	17,34	0,83 – 3,3 b	144	3,5-Dimethyl-4-(2-furyl)pyridine	80	78563-72-1	Möglich, aber viele andere Alternativen
2396	18,48	0,82 – 3,3 b	135	Phenol, 4-(1,1-dimethylpropyl)-	85	80-46-6	
2423	18,63	1,06 – 4,2 d	124,180	unbekannt			Ein Alkylbenzdiol analog zu CAS 500-66-3
2446	18,75	0,78 – 3,1 d	98,116	unbekannt			
2520	19,16	1,61 – 6,4 b	161	Benzenamine, 3,5-dichloro-	90	626-43-7	Dichloranilin als Teilstruktur
2720	20,27	0,53 – 2,1 d	111,141,196	unbekannt			
2752	20,45	0,56 – 2,2 d	192	unbekannt			Schwefel S6 + Interferenz
2776	20,58	0,80 – 3,2 d	91,112,173	unbekannt			
2804	20,74	2,98 – 11,9 d	123,137,180	unbekannt			
2945	21,52	0,89 – 3,6 d	106,137,183	unbekannt			
2989	21,76	3,22 – 12,9 b	140	Methyprylon	92	125-64-4	
3066	22,19	1,06 – 4,2 d	98,134,170	unbekannt			
3109	22,43	1,19 – 4,8 d	168,169,205	unbekannt			
3136	22,58	2,96 – 11,8 b	151	Butyldimethylsilyloxybenzene	82	NA	
3231	23,11	1,96 – 7,8 b	90	Benzenesulfonamide, 2-methyl-	87	88-19-7	
3232							Methylbenzsulfonamid CAS 88-19-7, F/RF 89/95%
3276	23,36	1,48 – 5,9 b	167	Aprobarbital	83	77-02-1	
3330	23,65	1,00 – 4,0 d	43,127,139	unbekannt			
3372	23,89	1,90 – 7,6 b	91	Benzenesulfonamide, 4-methyl-	88	70-55-3	
3407	24,08	2,50 – 10,0 d	144,169,198	unbekannt			
3460	24,38	0,69 – 2,7 d	91,132,207	unbekannt			
3641	25,38	0,51 – 2,0 d	99,119	unbekannt			Vermutlich ein Phosphorsäureester
3727	25,86	1,08 – 4,3 d	43,89,127,150	unbekannt			
3753	26,00	0,98 – 3,9 d	150,178,207	unbekannt			
3775	26,12	6,08 – 24,3 d	174,216	unbekannt			Sustituierter Aromat, N- und O-haltig

Auftraggeber
Projekt
Auftrag Nr.
Datum

HPC Harress Pickel Consult AG
U II "Kesslergrube", Grenzach-Wyhlen
A10-00306
15.04.2010

Anhang: **23**

Probenbezeichnung: **KE 33** Int. Probennummer: **M1002-01635**

Interne Standards				
Nr.	Name des Internen Standards (I.S.)	Konzentration (µg/l)	Wiederfindung (%)	Bemerkungen
a	Anilin d5	1,06	20	
b	Nitrobenzol d5	1,06	74	
c	Naphthalin d8	1,06	86	
d	1-Chlorododecan	1,06	130	
e	Acenaphthen d10	2.65	-	
				Volumen Standard

Nachgewiesene Substanzen							
Scan	RT (Min.)	µg/l (I.S. b/c/d)	Massen m/z (fett = Basispeak)	Name, Trivialname oder IUPAC	% Fit	CAS-Nr.	Bemerkungen
3842	26,49	18,64 – 74,6 d	93,190, 232	unbekannt			Gute Übereinst. mit 1-Phenyl-3-Methyl-4-Hydroxy-4-(Prop-2-yl)-2,5-Dihydropyrazol-5-on (Wiley9), F/RF 86/94%
3877	26,69	0,94 – 3,7 d	129, 216	unbekannt			
3941	27,04	0,53 – 2,1 d	136,154, 182	unbekannt			
3988	27,30	0,71 – 2,9 d	43 ,91,135,148	unbekannt			
4147	28,18	3,10 – 12,4 b	110, 202	unbekannt			
4298	29,02	9,53 – 38,1 b	215	Propyphenazone	94	479-92-5	MS zu wenig Information, heterozyklischer polyzyklischer Aromat
4374	29,44	2,09 – 8,4 b	155, 183	unbekannt			
4407	29,62	1,68 – 6,7 b	155, 183	unbekannt			
4476	30,01	2,45 – 9,8 d	256	Cyclic octaatomic sulfur	92	10544-50-0	
4559	30,47	6,67 – 26,7 b	169	unbekannt			
4580	30,58	0,46 – 1,8 b	230	Benz[c]isoxazole, 1,3-dihydro-5-chloro-3-phenyl-	82	NA	Nicht eindeutig
4669	31,08	2,85 – 11,4 d	144 ,195	unbekannt			
4800	31,80	2,19 – 8,8 d	130, 144 ,195	unbekannt			
5032	33,09	1,81 – 7,2 b	159	Benzene, 1,1'-sulfonylbis[4-chloro-	88	80-07-9	
5473	35,53	0,62 – 2,5 b	193	unbekannt			
5755	37,10	0,77 – 3,1 b	277	Triphenylphosphine oxide	90	791-28-6	

Aufkonzentrierungsfaktor: 630
Bestimmungsgrenze (IS Naphthalin): 0.5 µg/l

Auftraggeber
Projekt
Auftrag Nr.
Datum

HPC Harress Pickel Consult AG
U II "Kesslergrube", Grenzach-Wyhlen
A10-00306
09.04.2010

Anhang: **24**

Probenbezeichnung: P 7				Int. Probennummer: M1002-01636			
Interne Standards							
Nr.	Name des Internen Standards (I.S.)		Konzentration (µg/l)	Wiederfindung (%)		Bemerkungen	
a	Anilin d5		1,03	22			
b	Nitrobenzol d5		1,03	88			
c	Naphthalin d8		1,03	91			
d	1-Chlorododecan		1,03	87			
e	Acenaphthen d10		2,57	-		Volumen Standard	
Nachgewiesene Substanzen							
Scan	RT (Min.)	µg/l (I.S. b/c/d)	Massen m/z (fett = Basispeak)	Name, Trivialname oder IUPAC	% Fit	CAS-Nr.	Bemerkungen
1625	14,21	0,18 – 0,7 b	180	Benzene, 1,3,5-trichloro-	84	108-70-3	* oder Isomer
2026	16,43	0,31 – 1,2 b	159	2,4,5-Trichlorotoluene	88	6639-30-1	* oder Isomer
2129	17,00	0,38 – 1,5 b	161	Benzenamine, 2,3-dichloro-	87	608-27-5	* oder Isomer
2935	21,47	0,27 – 1,1 b	111,127,175	Benzene,1-chloro-4(methylsulfonyl)	78	98-57-7	
3513	24,67	0,17 – 0,7 b	284	Benzene, hexachloro-	85	118-74-1	* Co-elution
4114	28,01	0,23 – 0,9 b	90,126,205	unbekannt			chloriertes aromatisches Sulfonamid

Aufkonzentrierungsfaktor: 650
Bestimmungsgrenze (IS Naphthalin): 0.05 µg/l

Auftraggeber
Projekt
Auftrag Nr.
Datum

HPC Harress Pickel Consult AG
U II "Kesslergrube", Grenzach-Wyhlen
A10-00306
09.04.2010

Anhang: **25**

Probenbezeichnung: KE 24				Int. Probennummer:		M1002-01637		
Interne Standards								
Nr.	Name des Internen Standards (I.S.)		Konzentration (µg/l)	Wiederfindung (%)		Bemerkungen		
a	Anilin d5		1,07	22				
b	Nitrobenzol d5		1,07	92				
c	Naphthalin d8		1,07	95				
d	1-Chlorododecan		1,07	80				
e	Acenaphthen d10		2,68	-				
Nachgewiesene Substanzen								
Scan	RT (Min.)	µg/l (I.S. b/c/d)	Massen m/z (fett = Basispeak)	Name, Trivialname oder IUPAC	% Fit	CAS-Nr.	Bemerkungen	
983	10,65	0,11 – 0,4 d	84,106,190	unbekannt			Ein Tetrachlorbutadien + i	
2192	17,35	0,11 – 0,4 d	144,173	unbekannt			*	
2395	18,47	0,32 – 1,3 b	107,135	unbekannt			4-(1,1-Dimethylpropyl)-Phenol oder Isomer, F/Rf 87/92%	
2770	20,55	0,11 – 0,4 d	122,138,167	unbekannt			3-Etoxycarbonyl-2,5-Dimethylpyrrol (Wiley9) oder Isomer, MW 167, F/Rf 70/96%	
2937	21,48	0,20 – 0,8 b	111,127,175,190	unbekannt			1-Chlor-4-Methylsulfonylbenzol oder Isomer, F/Rf 82/85%	
3107	22,42	0,09 – 0,4 d	168,168,205	unbekannt			Subst. Aromat, N-, O-haltig, MW 181	
3133	22,56	0,08 – 0,3 d	136,151,181	unbekannt				Alkylsubst. Benzol, MW 176 (m/z 163 i)
3276	23,36	0,25 – 1,0 b	91,105,147	unbekannt				Gute Übereinst. mit 1-Phenyl-3-Methyl-4-Hydroxy-4-(Prop-2-yl)-2,5-Dihydropyrazol-5-on (Wiley9)
3822	26,38	0,19 – 0,8 d	93,190,232	unbekannt				*
4048	27,63	0,09 – 0,4 d	96,188	unbekannt			86	479-92-5
4115	28,01	0,14 – 0,6 b	90,126,205	unbekannt	* Hinweis auf polizyklische aromatische Verbindung			
4138	28,13	0,29 – 1,1 c	110,202	unbekannt	*			
4289	28,97	0,37 – 1,5 d	149,215,230	Propyphenazone				
4541	30,37	0,12 – 0,5 d	169	unbekannt	83	80-07-9	* Co-elution	
4941	32,58	0,53 – 2,1 d	137,165,193,211	unbekannt				
5029	33,07	0,11 – 0,4 d	159,161,286	Benzene,1,1'-sulfonylbis(4-chloro)				
5086	33,39	0,10 – 0,4 d	92,112,225	unbekannt				
5240	34,24	0,11 – 0,4 d	136.236,266,281	unbekannt	86	791-28-6	subst. Triazin	
5467	35,50	0,12 – 0,5 d	193	unbekannt				
5740	37,01	0,15 – 0,6 d	277	Triphenylphosphine oxid				
5974	38,31	0,09 – 0,4 d	226,255,256	unbekannt			Verm. ein polyzyklischer O-haltiger Aromat.	
6695	42,31	0,40 – 1,6 b	197,273,300,317	unbekannt			Verm. Polyzyklischer Aromatm it Heteroatomen	

Aufkonzentrierungsfaktor: 520
Bestimmungsgrenze (IS Naphthalin): 0.05 µg/l

Auftraggeber
Projekt
Auftrag Nr.
Datum

HPC Harress Pickel Consult AG
U II "Kesslergrube", Grenzach-Wyhlen
A10-00306
17.05.2010

Anhang: **26**

Probenbezeichnung: P 8				Int. Probennummer: M1002-01638			
Interne Standards							
Nr.	Name des Internen Standards (I.S.)	Konzentration (µg/l)	Wiederfindung (%)		Bemerkungen		
a	Anilin d5	1,02	19				
b	Nitrobenzol d5	1,02	94				
c	Naphthalin d8	1,02	97				
d	1-Chlorododecan	1,02	80				
e	Acenaphthen d10	2,55	-		Volumen Standard		
Nachgewiesene Substanzen							
Scan	RT (Min.)	µg/l (I.S. b/c/d)	Massen m/z (fett = Basispeak)	Name, Trivialname oder IUPAC	% Fit	CAS-Nr.	Bemerkungen
4046	27,63	0,70 – 2,8 b	156,173,220,235	unbekannt			
4114	28,01	0,11 – 0,4 b	90,126,205	unbekannt			
4467	29,96	0,35 – 1,4 d	256	i-Propyl hexadecanoate	85	NA	

Aufkonzentrierungsfaktor: 700
Bestimmungsgrenze (IS Naphthalin): 0.05 µg/l

Auftraggeber
Projekt
Auftrag Nr.
Datum

HPC Harress Pickel Consult AG
U II "Kesslergrube", Grenzach-Wyhlen
A10-00306
18.10.2010

Anhang: **27**

Probenbezeichnung: **P 5** Int. Probennummer: **M1002-01639**

Interne Standards

Nr.	Name des Internen Standards (I.S.)	Konzentration (µg/l)	Wiederfindung (%)	Bemerkungen
a	Anilin d5	14	23	
b	Nitrobenzol d5	14	72	
c	Naphthalin d8	14	78	
d	1-Chlorododecan	14	55	
e	Acenaphthen d10	35	-	

Nachgewiesene Substanzen

Scan	RT (Min.)	µg/l (I.S. b/c/d)	Massen m/z (fett = Basispeak)	Name, Trivialname oder IUPAC	% Fit	CAS-Nr.	Bemerkungen
613	8,59	18,3 – 73,2 b	146	Benzene, 1,4-dichloro-	92	106-46-7	
651	8,80	8,7 – 34,8 b	146	Benzene, 1,4-dichloro-	91	106-46-7	
769	9,46	3,8 – 15,4 b	146	Benzene, 1,4-dichloro-	90	106-46-7	
975	10,60	8,1 – 32,2 b	106	p-Aminotoluene	92	106-49-0	
1008	10,78	3,3 – 13,2 b	106	p-Aminotoluene	89	106-49-0	
1246	12,10	12,2 – 48,9 b	127	p-Chloroaniline	90	106-47-8	
1574	13,92	72,4 – 289,5 b	127	m-Chloroaniline	93	108-42-9	
1587	13,99	20,8 – 83,2 b	127	p-Chloroaniline	90	106-47-8	
1970	16,11	16,8 – 67,1 b	141	Benzenamine, 3-chloro-2-methyl-	91	87-60-5	
2000	16,28	26,0 – 104,0 b	141	Benzenamine, 5-chloro-2-methyl-	90	95-79-4	
2134	17,02	18,4 – 73,5 b	161	Benzenamine, 2,3-dichloro-	90	608-27-5	
2195	17,36	20,8 – 83,3 d	144	unbekannt			
2324	18,08	0,8 – 3,3 c	162	Naphthalene, 1-chloro-	89	90-13-1	
2525	19,19	51,4 – 205,4 b	161	Benzenamine, 3,5-dichloro-	92	626-43-7	
2783	20,62	2,9 – 11,5 b	175	2,4-Dichloro-6-methylaniline	82	30273-00-8	
2860	21,05	1,9 – 7,6 c	144	2-Naphthalenol	84	135-19-3	
2906	21,30	3,0 – 11,8 c	143	1-Naphthalenamine	91	134-32-7	
2942	21,50	5,5 – 21,8 d	111	unbekannt			
2973	21,67	10,3 – 41,3 b	140	Methyprylon	91	125-64-4	
3109	22,43	5,7 – 23,0 b	168	[1,1'-Biphenyl]-2-amine	85	90-41-5	
3143	22,62	6,8 – 27,2 b	69	Crotamiton	83	483-63-6	
3160	22,71	3,2 – 12,7 b	105	Phenyl cyclohexyl ketone	84	712-50-5	
3191	22,88	6,7 – 26,8 b	159	5-Amino-1-phenylpyrazole	90	826-85-7	
3215	23,02	2,8 – 11,2 b	169	2-p-Tolylpyridine	88	4467-06-5	
3235	23,13	7,6 – 30,3 b	90	Benzenesulfonamide, 2-methyl-	81	88-19-7	
3268	23,31	3,9 – 15,5 b	167	Aprobarbital	81	77-02-1	
3367	23,86	7,9 – 31,7 b	91	Benzenesulfonamide, 4-methyl-	81	70-55-3	
3408	24,09	24,4 – 97,5 d	144	unbekannt			
3692	25,66	5,5 – 21,8 b	177	unbekannt			Hinweis auf chlorierte Naphthalin Verbindung
3762	26,05	32,4 – 129,5 d	142	unbekannt			
3826	26,40	26,7 – 106,8 d	232	unbekannt			
3876	26,68	24,1 – 96,4 d	216	unbekannt			
3897	26,80	8,4 – 33,4 d	171	unbekannt			
3984	27,28	3,1 – 12,3 b	184	2-Dibenzofuranol	85	86-77-1	Co-elution
4014	27,44	12,8 – 51,3 b	189	Glutethimide	88	77-21-4	
4060	27,70	5,8 – 23,4 b	188	Antipyrine	87	60-80-0	
4146	28,18	61,2 – 244,8 d	110	unbekannt			
4254	28,77	2,6 – 10,5 b	196	4-Hydroxy-9-fluorenone	85	1986-00-1	
4294	29,00	48,5 – 194,1 b	215	Propyphenazone	91	479-92-5	
4374	29,44	4,1 – 16,5 b	183	3-Dibenzofuranamine	83	4106-66-5	
4407	29,62	3,6 – 14,3 b	183	3-Dibenzofuranamine	85	4106-66-5	
4477	30,01	26,4 – 105,4 d	255	Cyclic octaatomic sulfur	92	10544-50-0	
4548	30,40	17,5 – 69,8 d	169	unbekannt			
4583	30,60	3,4 – 13,7 b	232	Methanone, (2-amino-5-chlorophenyl)phenyl-	84	719-59-5	

Auftraggeber
Projekt
Auftrag Nr.
Datum

HPC Harress Pickel Consult AG
U II "Kesslergrube", Grenzach-Wyhlen
A10-00306
18.10.2010

Anhang: **27**

Probenbezeichnung: P 5				Int. Probennummer: M1002-01639			
Interne Standards							
Nr.	Name des Internen Standards (I.S.)		Konzentration (µg/l)	Wiederfindung (%)		Bemerkungen	
a	Anilin d5		14	23			
b	Nitrobenzol d5		14	72			
c	Naphthalin d8		14	78			
d	1-Chlorododecan		14	55			
e	Acenaphthen d10		35	-			
Nachgewiesene Substanzen							
Scan	RT (Min.)	µg/l (I.S. b/c/d)	Massen m/z (fett = Basispeak)	Name, Trivialname oder IUPAC	% Fit	CAS-Nr.	Bemerkungen
4608	30,74	44,2 – 176,7 d	181 152,165,210	unbekannt			
4659	31,02	40,1 – 160,2 d	221	Heptabarbital	90	509-86-4	
4794	31,77	6,6 – 26,5 d	144 130, 195	unbekannt			
4842	32,03	14,4 – 57,8 d	73	Octadecanoic acid	87	57-11-4	
4969	32,74	7,4 – 29,6 d	249	unbekannt			
5032	33,09	58,0 – 231,8 b	159	Benzene, 1,1'-sulfonylbis[4-chloro-	93	80-07-9	
5745	37,04	9,0 – 36,1 b	277	Triphenylphosphine oxide	89	791-28-6	

Auftraggeber
Projekt
Auftrag Nr.
Datum

HPC Harress Pickel Consult AG
U II "Kesslergrube", Grenzach-Wyhlen
A10-00306
18.10.2010

Anhang: **27**

Probenbezeichnung: P 5			Int. Probennummer: M1002-01639				
Interne Standards							
Nr.	Name des Internen Standards (I.S.)	Konzentration n (µg/l)	Wiederfindung (%)	Bemerkungen			
a	Anilin d5	14	23				
b	Nitrobenzol d5	14	72				
c	Naphthalin d8	14	78				
d	1-Chlorododecan	14	55				
e	Acenaphthen d10	35	-				
Nachgewiesene Substanzen							
Scan	RT (Min.)	µg/l (I.S. b/c/d)	Massen m/z (fett = Basispeak)	Name, Trivialname oder IUPAC	% Fit	CAS-Nr.	Bemerkungen
2448	18,76	2,6 – 10,5 d	153 123,138,152	unbekannt			
2730	20,33	4,2 – 16,8 d	81 79,105,122	unbekannt			
2807	20,75	2,7 – 10,8 d	92 107,121,164	unbekannt			
3428	24,20	4,1 – 16,3 d	120 134,135,162	unbekannt			
4125	28,06	2,6 – 10,5 d	205 90,126,207	unbekannt			
4236	28,68	2,9 – 11,5 d	231 56,97,111	unbekannt			
4527	30,29	3,9 – 15,5 d	189 77,105,107	unbekannt			
4762	31,59	3,8 – 15,3 d	180 137,165,228	unbekannt			
5238	34,23	3,0 – 12,1 d	144 72,145,188	unbekannt			
6529	41,38	4,6 – 18,2 d	98 72,83,253	unbekannt			
6530	41,39	4,8 – 19,3 d	98 72,83,253	unbekannt			

Aufkonzentrierungsfaktor: 70
Bestimmungsgrenze (IS Naphthalin): 1 µg/l

Auftraggeber
Projekt
Auftrag Nr.
Datum

HPC Harress Pickel Consult AG
U II "Kesslergrube", Grenzach-Wyhlen
A10-00306
18.10.2010

Anhang: **28**

Probenbezeichnung: P 4				Int. Probennummer:				M1002-01640							
Interne Standards															
Nr.		Name des Internen Standards (I.S.)			Konzentration (µg/l)		Wiederfindung (%)		Bemerkungen						
a		Anilin d5			1,02		21								
b		Nitrobenzol d5			1,02		90								
c		Naphthalin d8			1,02		85								
d		1-Chlorododecan			1,02		83								
e		Acenaphthen d10			2,54		-		Volumen Standard						
Nachgewiesene Substanzen															
Scan		RT (Min.)		µg/l (I.S. b/c/d)		Massen m/z (fett =		Name, Trivialname oder IUPAC		% Fit		CAS-Nr.		Bemerkungen	
616		8,61		0,15 – 0,6 b		146		Benzene, 1,2-dichloro-		88		95-50-1		Interferenz m/z 143, sonst ok vermutlich ein subst. Cyclohexen	
654		8,82		0,22 – 0,9 b		146		Benzene, 1,4-dichloro-		87		106-46-7			
773		9,48		0,91 – 3,6 b		83		Benzene, 1,4-dichloro-		83		106-46-7			
1092		11,25		0,41 – 1,7 d		81		unbekannt							
1362		12,74		2,71 – 10,8 b		110		Phenol, 2-ethoxy-		89		94-71-3			
1810		15,23		0,50 – 2,0 b		152		2-Ethoxy-4-methylphenol		89		2563-07-7			
1967		16,10		0,60 – 2,4 b		141		Benzenamine, 3-chloro-2-methyl-		89		87-60-5			
1997		16,26		0,48 – 1,9 b		141		Benzenamine, 4-chloro-2-methyl-		85		95-69-2			
2130		17,00		0,32 – 1,3 b		161		Benzenamine, 3,5-dichloro-		87		626-43-7			
2360		18,28		0,20 – 0,8 b		77		Sulfone, methyl phenyl		84		3112-85-4			
2397		18,48		3,63 – 14,5 b		135		Phenol, 4-(1,1-dimethylpropyl)-		90		80-46-6			
2456		18,81		0,76 – 3,0 b		160		1H-Isoindole, 3-methoxy-4,7-dimethyl-		84		100813-60-3			
2522		19,17		0,15 – 0,6 b		161		Benzenamine, 3,5-dichloro-		85		626-43-7			
2753		20,45		0,13 – 0,5 d		192		Sulfur		85		13798-23-7			
2834		20,90		0,46 – 1,8 b		191		Phenol, 2,5-bis(1,1-dimethylethyl)-		83		5875-45-6			
2903		21,29		1,50 – 6,0 c		143		1-Naphthalenamine		90		134-32-7			
2938		21,48		2,11 – 8,4 b		111		Benzene, 1-Chloro-4-(methylsulfonyl)		80		98-57-7			
3279		23,37		2,98 – 11,9 b		105		Benzene, (1,1-diethylpropyl)-		85		4170-84-7		Toluolsulfonamid CAS 70-55-3 oder Isomer, Interferenz m/z 155, 171, 205, RF 87%	
3357		23,80		0,55 – 2,2 d		91,176		unbekannt							
3437		24,25		0,10 – 0,4 d		259		2,2,7,7-Tetramethyl-tetrahydro-bis[1,3]dioxolo[4,5-b;4',5'-d]pyran-3a-carboxylic acid		82		NA		Polyzyklisch, heteroatomhaltig, zu wenig Information	
3774		26,11		1,24 – 5,0 d		174,216		unbekannt							
3824		26,39		1,20 – 4,8 d		93,190,232		unbekannt						Gute Übereinst. mit 1-Phenyl-3-Methyl-4-Hydroxy-4-(Prop-2-yl)-2,5-Dihydropyrazol-5-on (Wiley9), F/RF 89/93%	
4144		28,16		4,76 – 19,0 d		77,110,202		unbekannt							
4243		28,71		0,92 – 3,7 b		226		Terbutryn		82		886-50-0		MS zu wenig Information, heterozyklischer, polyzyklischer Aromat	
4292		28,99		4,28 – 17,1 b		215		Propyphenazone		90		479-92-5			
4372		29,43		0,40 – 1,6 b		183		3-Dibenzofuranamine		85		4106-66-5			
4475		30,00		1,18 – 4,7 d		256		Cyclic octaatomic sulfur		89		10544-50-0			
4545		30,39		0,98 – 3,9 b		169		2-[2-Quinolylmethyleneamino]ethanol		82		5971-05-1			
4581		30,59		0,62 – 2,5 b		230		Methanone, (2-amino-5-chlorophenyl)phenyl-		87		719-59-5			
														oder a,a-Bis(2-cyanoethyl)benzylcyanid	

Auftraggeber
Projekt
Auftrag Nr.
Datum

HPC Harress Pickel Consult AG
U II "Kesslergrube", Grenzach-Wyhlen
A10-00306
18.10.2010

Anhang: **28**

Probenbezeichnung: P 4				Int. Probennummer: M1002-01640			
Interne Standards							
Nr.	Name des Internen Standards (I.S.)		Konzentrat ion (µg/l)	Wiederfindung (%)		Bemerkungen	
a	Anilin d5		1,02	21			
b	Nitrobenzol d5		1,02	90			
c	Naphthalin d8		1,02	85			
d	1-Chlorododecan		1,02	83			
e	Acenaphthen d10		2,54	-		Volumen Standard	
Nachgewiesene Substanzen							
Scan	RT (Min.)	µg/l (I.S. b/c/d)	Massen m/z (fett =)	Name, Trivialname oder IUPAC	% Fit	CAS-Nr.	Bemerkungen
4945	32,60	1,97 – 7,9 b	137,165,166,193	unbekannt			Ein Sulfonamid
5088	33,40	2,14 – 8,6 b	112,156,225	unbekannt			
5496	35,66	0,79 – 3,2 b	177	Phenol, 2,2'-methylenebis[6-(1,1-dimethylethyl)-4-methyl-	82	119-47-1	
5749	37,06	4,50 – 18,0 b	277	Triphenylphosphine oxide	92	791-28-6	

Auftraggeber
Projekt
Auftrag Nr.
Datum

HPC Harress Pickel Consult AG
U II "Kesslergrube", Grenzach-Wyhlen
A10-00306
18.10.2010

Anhang: **28**

Probenbezeichnung: P 4				Int. Probennummer:				M1002-01640			
Interne Standards											
Nr.		Name des Internen Standards (I.S.)			Konzentrat ion (µg/l)		Wiederfindung (%)		Bemerkungen		
a		Anilin d5			1,02		21				
b		Nitrobenzol d5			1,02		90				
c		Naphthalin d8			1,02		85				
d		1-Chlorododecan			1,02		83				
e		Acenaphthen d10			2,54		-		Volumen Standard		
Nachgewiesene Substanzen											
Scan	RT (Min.)	µg/l (I.S. b/c/d)			Massen m/z (fett =		Name, Trivialname oder IUPAC		% Fit	CAS-Nr.	Bemerkungen
1908	15,77	0,13	–	0,5 d	148	66,79,91	unbekannt				
2193	17,35	0,12	–	0,5 d	144	134,173,179	unbekannt				
2258	17,71	0,05	–	0,2 d	91	107,135,159	unbekannt				
2485	18,97	0,24	–	1,0 d	95	43,137,151	unbekannt				
2772	20,56	0,34	–	1,4 d	91	132,138,173	unbekannt				
2802	20,73	0,14	–	0,5 d	164	92,107,121	unbekannt				
2976	21,69	0,09	–	0,3 d	135	77,107,171	unbekannt				
3006	21,86	0,13	–	0,5 d	167	96,168,169	unbekannt				
3038	22,03	0,04	–	0,2 d	110	146,183,185	unbekannt				
3106	22,41	0,44	–	1,7 d	169	167,168,205	unbekannt				
3137	22,58	0,24	–	1,0 d	71	136,151,181	unbekannt				
3405	24,07	0,44	–	1,8 d	144	130,169,198	unbekannt				
3502	24,61	0,07	–	0,3 d	135	129,145,171	unbekannt				
3539	24,81	0,12	–	0,5 d	93	43,72,219	unbekannt				
3672	25,55	0,50	–	2,0 d	137	91,150,155	unbekannt				
3861	26,60	0,18	–	0,7 d	137	165,208,246	unbekannt				
3936	27,01	0,34	–	1,4 d	182	136,154,183	unbekannt				
4124	28,05	0,23	–	0,9 d	205	90,126,207	unbekannt				
4173	28,33	0,23	–	0,9 d	241	105,184,226	unbekannt				
4406	29,62	0,15	–	0,6 d	183	97,155,184	unbekannt				
4604	30,71	0,06	–	0,2 d	71	140,165,181	unbekannt				
5470	35,51	0,22	–	0,9 d	193	165,194,323	unbekannt				
5518	35,78	0,43	–	1,7 d	178	160,164,206	unbekannt				
5913	37,97	0,10	–	0,4 d	286	71,119,257	unbekannt				
5975	38,31	0,14	–	0,6 d	255	72,226,256	unbekannt				
6439	40,89	0,23	–	0,9 d	336	261,279,306	unbekannt				

Aufkonzentrierungsfaktor: 660
Bestimmungsgrenze (IS Naphthalin): 0.1 µg/l

Auftraggeber
Projekt
Auftrag Nr.
Datum

HPC Harress Pickel Consult AG
U II "Kesslergrube", Grenzach-Wyhlen
A10-00306
09.04.2010

Anhang: **29**

Probenbezeichnung: P 16a				Int. Probennummer: M1002-01641				
Interne Standards								
Nr.	Name des Internen Standards (I.S.)		Konzentration n (µg/l)	Wiederfindung (%)	Bemerkungen			
a	Anilin d5		1,03	22	Volumen Standard			
b	Nitrobenzol d5		1,03	89				
c	Naphthalin d8		1,03	82				
d	1-Chlorododecan		1,03	124				
e	Acenaphthen d10		2,56	-				
Nachgewiesene Substanzen								
Scan	RT (Min.)	µg/l (I.S. b/c/d)		Massen m/z (fett = Basispeak)	Name, Trivialname oder IUPAC	% Fit	CAS-Nr.	Bemerkungen
776	9,50	2,64 – 10,6 d	117	173	Indane	90	496-11-7	
1243	12,09	0,58 – 2,3 d	127		o-Chloroaniline	91	95-51-2	
1362	12,75	5,10 – 20,4 d	110		Phenol, 2-ethoxy-	87	94-71-3	
1493	13,47	2,21 – 8,8 d	128		Naphthalene	93	91-20-3	
1572	13,91	2,07 – 8,3 d	127		p-Chloroaniline	93	106-47-8	
1810	15,23	0,70 – 2,8 d	152		2-Ethoxy-4-methylphenol	91	2563-07-7	
1968	16,10	1,06 – 4,2 d	141		Benzenamine, 3-chloro-2-methyl-	90	87-60-5	
1998	16,27	0,61 – 2,4 d	141		Benzenamine, 3-chloro-2-methyl-	89	87-60-5	
2131	17,01	0,85 – 3,4 d	161		Benzenamine, 3,5-dichloro-	91	626-43-7	
2192	17,35	1,10 – 4,4 d	144		unbekannt			
2321	18,06	0,44 – 1,8 d	162		Naphthalene, 1-chloro-	90	90-13-1	
2360	18,28	2,33 – 9,3 d	77		Sulfone, methyl phenyl	89	3112-85-4	
2398	18,49	3,83 – 15,3 d	135		Phenol, 4-(1,1-dimethylpropyl)-	93	80-46-6	
2445	18,75	0,51 – 2,0 d	158		1,4-Naphthalenedione	84	130-15-4	
2523	19,18	1,14 – 4,6 d	161	Benzenamine, 3,5-dichloro-	91	626-43-7		
2720	20,27	0,53 – 2,1 d	153	Acenaphthene	92	83-32-9		
2754	20,46	0,72 – 2,9 d	192	Sulfur	93	13798-23-7		
2774	20,57	0,77 – 3,1 d	91	132,173,192	unbekannt			
2806	20,75	0,40 – 1,6 d	91	121,164	unbekannt			
2906	21,30	9,40 – 37,6 d	143	175, 190	1-Naphthalenamine	91	134-32-7	
2948	21,54	11,47 – 45,9 d	111		unbekannt			
3107	22,42	0,87 – 3,5 d	169	107, 149	[1,1'-Biphenyl]-2-amine	82	90-41-5	
3213	23,01	0,41 – 1,6 d	169		2-p-Tolylpyridine	91	4467-06-5	
3286	23,41	2,28 – 9,1 d	91		Benzene, (1,1-diethylpropyl)-	85	4170-84-7	
3366	23,85	1,47 – 5,9 d	91	169,198	Benzenesulfonamide, 4-methyl-	80	70-55-3	Koelution
3407	24,08	0,88 – 3,5 d	144		unbekannt			
3503	24,61	0,76 – 3,0 d	135	105, 188	unbekannt			
3532	24,77	1,23 – 4,9 d	135		unbekannt			
3558	24,92	0,84 – 3,4 d	135	148,178,214	unbekannt			
3582	25,05	0,55 – 2,2 d	212		unbekannt			Chlororganische Verbindung
3722	25,83	1,26 – 5,0 d	160		unbekannt			
3770	26,09	4,40 – 17,6 d	142	93, 190	unbekannt			
3835	26,45	7,06 – 28,3 d	232		unbekannt			
4016	27,46	2,03 – 8,1 d	189	190, 230	Glutethimide	89	77-21-4	
4090	27,87	0,65 – 2,6 d	188		Antipyrine	85	60-80-0	Koelution
4152	28,21	6,54 – 26,2 d	202		unbekannt			
4302	29,04	11,95 – 47,8 d	215	152,165,210	unbekannt			
4489	30,08	20,68 – 82,7 d	256		Cyclic octaatomic sulfur	90	10544-50-0	
4561	30,48	1,85 – 7,4 d	169		unbekannt			
4583	30,60	0,75 – 3,0 d	230	142,169	unbekannt			
4608	30,74	0,76 – 3,1 d	181		unbekannt			substituiertes Alkan
4805	31,83	1,49 – 6,0 d	144		unbekannt			
5055	33,22	68,66 – 274,6 d	158	94	Benzene, 1,1'-sulfonylbis[4-chloro-	80-07-9		
5773	37,20	2,86 – 11,4 d	277		Triphenylphosphine oxide	91	791-28-6	
5917	37,99	0,53 – 2,1 d	286		[1,1'-Binaphthalene]-2,2'-diol	84	602-09-5	Koelution

Auftraggeber
Projekt
Auftrag Nr.
Datum

HPC Harress Pickel Consult AG
U II "Kesslergrube", Grenzach-Wyhlen
A10-00306
09.04.2010

Anhang: **29**

Probenbezeichnung: P 16a				Int. Probennummer:				M1002-01641		
Interne Standards										
Nr.	Name des Internen Standards (I.S.)			Konzentration n (µg/l)	Wiederfindung (%)		Bemerkungen			
a	Anilin d5			1,03	22					
b	Nitrobenzol d5			1,03	89					
c	Naphthalin d8			1,03	82					
d	1-Chlorododecan			1,03	124					
e	Acenaphthen d10			2,56	-		Volumen Standard			
Nachgewiesene Substanzen										
Scan	RT (Min.)	µg/l (I.S. b/c/d)			Massen m/z (fett = Basispeak)	Name, Trivialname oder IUPAC		% Fit	CAS-Nr.	Bemerkungen
6411	40,73	0,50	– 2,0 d	69		2,6,10,14,18,22-Tetracosahexaene, 2,6,10,15,19,23-hexamethyl-, (all-E)-		87	111-02-4	Squalen

Aufkonzentrierungsfaktor: 650
Bestimmungsgrenze (IS Acenaphthen): 0.7 µg/l

Auftraggeber
Projekt
Auftrag Nr.
Datum

HPC Harress Pickel Consult AG
U II "Kesslergrube", Grenzach-Wyhlen
A10-00306
09.04.2010

Anhang: **30**

Probenbezeichnung: Blind 4				Int. Probennummer: M1002-01642				
Interne Standards								
Nr.	Name des Internen Standards (I.S.)		Konzentration (µg/l)	Wiederfindung (%)		Bemerkungen		
a	Anilin d5		1,04	22				
b	Nitrobenzol d5		1,04	93				
c	Naphthalin d8		1,04	94				
d	1-Chlorododecan		1,04	84				
e	Acenaphthen d10		2,59	-		Volumen Standard		
Nachgewiesene Substanzen								
Scan	RT (Min.)	µg/l (I.S. b/c/d)	Massen m/z (fett = Basispeak)	Name, Trivialname oder IUPAC		% Fit	CAS-Nr.	Bemerkungen
6295	40.12	0.58 - 2.3 d	59.72	13-Docosenamide, (Z)-		82	112-84-5	

Aufkonzentrierungsfaktor: 640
Bestimmungsgrenze (IS Naphthalin): 0.05 µg/l

Auftraggeber
Projekt
Auftrag Nr.
Datum

HPC Harress Pickel Consult AG
U II "Kesslergrube", Grenzach-Wyhlen
A10-00306
09.04.2010

Anhang: **31**

Probenbezeichnung: Blind 3			Int. Probennummer:		M1002-01643		
Interne Standards							
Nr.	Name des Internen Standards (I.S.)	Konzentration (µg/l)	Wiederfindung (%)		Bemerkungen		
a	Anilin d5	1,09	17				
b	Nitrobenzol d5	1,09	70				
c	Naphthalin d8	1,09	70				
d	1-Chlorododecan	1,09	60				
e	Acenaphthen d10	2,73	-		Volumen Standard		
Nachgewiesene Substanzen							
Scan	RT (Min.)	µg/l (I.S. b/c/d)	Massen m/z (fett = Basispeak)	Name, Trivialname oder IUPAC	% Fit	CAS-Nr.	Bemerkungen
6294	40,09	0,44 – 1,7 d	72	13-Docosenamide (Z)	80	112-84-5	

Aufkonzentrierungsfaktor: 610
Bestimmungsgrenze (IS Naphthalin): 0.05 µg/l

Auftraggeber
Projekt
Auftrag Nr.
Datum

HPC Harress Pickel Consult AG
U II "Kesslergrube", Grenzach-Wyhlen
A10-00306
09.04.2010

Anhang: **32**

Probenbezeichnung: P 2				Int. Probennummer:				M1002-01644			
Interne Standards											
Nr.		Name des Internen Standards (I.S.)			Konzentration (µg/l)		Wiederfindung (%)			Bemerkungen	
a		Anilin d5			1,13		34			Co-elution	
b		Nitrobenzol d5			1,13		112				
c		Naphthalin d8			1,13		123				
d		1-Chlorododecan			1,13		190				
e		Acenaphthen d10			2,83		-				
Nachgewiesene Substanzen											
Scan	RT (Min.)	µg/l (I.S. b/c/d)			Massen m/z (fett = Basispeak)		Name, Trivialname oder IUPAC		% Fit	CAS-Nr.	Bemerkungen
714	9,15	0,08	–	0,3	c	146		Benzene, 1,2-dichloro-	87	95-50-1	subst. Cyclohexan
831	9,80	0,10	–	0,4	c	83,141,146		unbekannt			
1146	11,55	0,38	–	1,5	c	67,81,86		unbekannt			
1415	13,04	0,25	–	1,0	c	110		Phenol, 2-ethoxy-	87	94-71-3	
2023	16,41	0,15	–	0,6	c	141		Benzenamine, 5-chloro-2-methyl-	83	95-79-4	
2052	16,57	0,08	–	0,3	c	141		Benzenamine, 5-chloro-2-methyl-	83	95-79-4	subst. Cyclohexan
2186	17,31	0,06	–	0,2	c	161		Benzenamine, 3,5-dichloro-	85	626-43-7	
2246	17,64	0,15	–	0,6	c	144,173,179		unbekannt			
2449	18,77	0,66	–	2,6	c	135		Phenol, 4-(1,1-dimethylpropyl)-	90	80-46-6	
2510	19,11	0,10	–	0,4	c	160		1H-Isoindole, 3-methoxy-4,7-dimethyl-	85	100813-60-3	
2528	19,21	0,58	–	2,3	c	151		2,4,7,9-Tetramethyl-5-decyn-4,7-diol	91	126-86-3	
2723	20,29	0,41	–	1,6	c	177		2,5-Cyclohexadiene-1,4-dione, 2,6-bis(1,1-dimethylethyl)-	87	719-22-2	
2825	20,85	0,20	–	0,8	c	91,138,171,173		unbekannt			
2856	21,03	0,03	–	0,1	c	92,121,164		unbekannt			
2887	21,20	0,06	–	0,2	c	191		Phenol, 2,5-bis(1,1-dimethylethyl)-	86	5875-45-6	
2961	21,61	0,25	–	1,0	c	143		1-Naphthalenamine	89	134-32-7	zuckerähnliche Struktur
2994	21,79	0,46	–	1,8	c	111		Benzene, 1-chloro-4-(methylsulfonyl)-	82	98-57-7	
3062	22,17	0,04	–	0,2	c	167,168		unbekannt			
3164	22,73	0,23	–	0,9	c	169		[1,1'-Biphenyl]-2-amine	82	90-41-5	
3220	23,04	0,56	–	2,2	c	245		(2,2,5,5-Tetramethyldihydro-1,3,4,6,8-pentaoxacyclopenta[a]inden-3a-yl)methanol	86	NA	
3336	23,69	0,48	–	1,9	c	91		Benzene, (1,1-diethylpropyl)-	84	4170-84-7	
3414	24,12	0,33	–	1,3	c	176		unbekannt			
3462	24,38	0,25	–	1,0	c	130,144,169		unbekannt			
3494	24,56	0,06	–	0,3	c	259		2,2,7,7-Tetramethyl-tetrahydro-bis[1,3]dioxolo[4,5-b;4',5'-d]pyran-3a-carboxylic acid	83	NA	
3730	25,87	0,04	–	0,2	c	91,155,212		unbekannt			
3883	26,72	0,35	–	1,4	c	93,190,232		unbekannt			ev. 1-Phenyl-3-methyl-4-hydroxy-4(prop-2-yl)2,5-dihydropropazol-5-on (Wiley9) Teilstruktur subst. Pyridin
3962	27,16	0,13	–	0,5	c	94,152		unbekannt			
4071	27,76	0,40	–	1,6	c	189		Glutethimide	87	77-21-4	
4115	28,00	0,23	–	0,9	c	188		Antipyrine	90	60-80-0	
4183	28,38	2,09	–	8,4	c	235		Benzoic acid, 3,5-bis(1,1-dimethylethyl)-4-hydroxy-	88	1421-49-4	
4205	28,50	1,58	–	6,3	c	202		unbekannt			

Auftraggeber
Projekt
Auftrag Nr.
Datum

HPC Harress Pickel Consult AG
U II "Kesslergrube", Grenzach-Wyhlen
A10-00306
09.04.2010

Anhang: **32**

Probenbezeichnung: P 2				Int. Probennummer:		M1002-01644	
Interne Standards							
Nr.	Name des Internen Standards (I.S.)	Konzentration (µg/l)	Wiederfindung (%)		Bemerkungen		
a	Anilin d5	1,13	34		Co-elution		
b	Nitrobenzol d5	1,13	112				
c	Naphthalin d8	1,13	123				
d	1-Chlorododecan	1,13	190				
e	Acenaphthen d10	2,83	-				
Nachgewiesene Substanzen							
Scan	RT (Min.)	µg/l (I.S. b/c/d)	Massen m/z (fett = Basispeak)	Name, Trivialname oder IUPAC	% Fit	CAS-Nr.	Bemerkungen
4305	29,06	0,11 – 0,5 c	185	Terbutryn	80	886-50-0	ev. a,a-Bis(2-cyanoethylbenzyl)cyanid Wiley9)
4345	29,28	0,90 – 3,6 c	73	n-Hexadecanoic acid	82	57-10-3	
4523	30,27	0,46 – 1,8 c	102,256	i-Propyl hexadecanoate	90	NA	
4543	30,38	0,52 – 2,1 c	256	Cyclic octaatomic sulfur	91	10544-50-0	
4605	30,72	0,22 – 0,9 c	169	unbekannt			
4642	30,92	0,09 – 0,4 c	230	Benz[c]isoxazole, 1,3-dihydro-5-chloro-3-phenyl-	87	NA	Eher CAS719-59-5 (2-Amino-5-Chlorphenyl)phenylmethanon MW 231
5093	33,42	0,26 – 1,0 c	159	Benzene, 1,1'-sulfonylbis[4-chloro-	85	80-07-9	Teilstruktur arom. Sulfonamid verm. Oktadekansäurebutylester CAS 123-95-5
5152	33,75	0,39 – 1,6 c	112	unbekannt			
5474	35,54	0,18 – 0,7 c	56,57,129,285	unbekannt			
5530	35,85	0,18 – 0,7 c	193	unbekannt			
5812	37,41	0,16 – 0,6 c	277	Triphenylphosphine oxide	88	791-28-6	
6039	38,67	0,09 – 0,4 c	255,256	unbekannt			verm. Biquinolin CAS 119-91-5 zuckerähnliche Struktur zuckerähnliche Struktur polycykl. Arom. N-haltige Struktur
6252	39,85	0,07 – 0,3 c	113,185,243	unbekannt			
6293	40,08	0,07 – 0,3 c	113,185,243	unbekannt			
6502	41,23	0,15 – 0,6 c	261,279,304,336	unbekannt			
7004	44,02	0,18 – 0,7 c	285,312,342	unbekannt			

Aufkonzentrierungsfaktor: 589
Bestimmungsgrenze: 0.05 µg/l

Auftraggeber
Projekt
Auftrag Nr.
Datum

HPC Harress Pickel Consult AG
U II "Kesslergrube", Grenzach-Wyhlen
A10-00306
18.10.2010

Anhang: **33**

Probenbezeichnung: KE 31				Int. Probennummer: M1002-01645				
Interne Standards								
Nr.	Name des Internen Standards (I.S.)		Konzentration (µg/l)	Wiederfindung (%)		Bemerkungen		
a	Anilin d5		0,99	13		Volumen Standard		
b	Nitrobenzol d5		0,99	79				
c	Naphthalin d8		0,99	76				
d	1-Chlorododecan		0,99	105				
e	Acenaphthen d10		2,47	-				
Nachgewiesene Substanzen								
Scan	RT (Min.)	µg/l (I.S. b/c/d)	Massen m/z (fett = Basispeak)	Name, Trivialname oder IUPAC	% Fit	CAS-Nr.	Bemerkungen	
653	8,82	0,41 – 1,6 b	146	Benzene, 1,2-dichloro-	88	95-50-1	Substituiertes Furanon	
772	9,48	1,31 – 5,2 d	43,83,141	unbekannt				
1091	11,24	2,27 – 9,1 d	81	Cyclopropane, (2-methylenbutyl)-	80	74685-56-6		alkylsubstituiertes Cyclohexen
1361	12,74	5,27 – 21,1 b	110	Phenol, 2-ethoxy-	89	94-71-3		
1810	15,23	1,19 – 4,8 b	152	2-Ethoxy-4-methylphenol	89	2563-07-7		
1968	16,11	1,09 – 4,3 b	141	Benzenamine, 3-chloro-2-methyl-	88	87-60-5		
1998	16,27	1,08 – 4,3 b	141	Benzenamine, 3-chloro-2-methyl-	89	87-60-5		
2131	17,01	0,69 – 2,8 b	161	Benzenamine, 3,5-dichloro-	88	626-43-7		
2397	18,48	8,41 – 33,7 b	135	Phenol, 4-(1,1-dimethylpropyl)-	92	80-46-6		
2484	18,97	0,83 – 3,3 d	43,95	unbekannt				
2772	20,56	1,98 – 7,9 b	91,138,173	unbekannt				
2904	21,29	1,19 – 4,8 c	143	1-Naphthalenamine	90	134-32-7		
2939	21,49	2,90 – 11,6 b	111	Benzene, 1-chloro-4-(methylsulfonyl)-	80	98-57-7		Isomer dazu (m/z 127 versus 128)
3105	22,41	3,29 – 13,2 b	116,168,169,205	unbekannt				
3139	22,60	0,78 – 3,1 b	135	Pyrrole-3-carboxylic acid, 4-formyl-5-methyl-, ethyl ester	85	332414-41-2		
3282	23,39	6,33 – 25,3 b	91	Benzene, (1,1-diethylpropyl)-	85	4170-84-7		
3368	23,87	1,65 – 6,6 b	91	Benzenesulfonamide, 4-methyl-	87	70-55-3		
3406	24,08	1,70 – 6,8 b	144,169	unbekannt				
3438	24,25	0,44 – 1,8 d	259	2,2,7,7-Tetramethyl-tetrahydro-bis[1,3]dioxolo[4,5-b;4',5'-d]pyran-3a-carboxylic acid	87	NA		
3775	26,12	1,53 – 6,1 d	174,216	unbekannt				
3829	26,42	2,02 – 8,1 d	43,93,190,232	unbekannt			Gute Übereinst. mit 1-Phenyl-3-Methyl-4-Hydroxy-4-(Prop-2-yl)-2,5-Dihydropyrazol-5-on (Wiley9), F/RF 85/95%	
3943	27,05	1,28 – 5,1 b	136,154,182	unbekannt			MS zu wenig Information, heterozyklischer polyzyklischer Aromat	
4013	27,44	2,12 – 8,5 d	189	Glutethimide	90	77-21-4		
4059	27,70	2,38 – 9,5 b	188	Antipyrine	92	60-80-0		
4149	28,19	19,17 – 76,7 b	202	unbekannt				
4294	29,00	6,78 – 27,1 b	215	Propyphenazone	92	479-92-5		
4547	30,40	2,21 – 8,8 b	169	4-Benzylpyrimidine	83	64660-82-8		
4582	30,59	1,16 – 4,6 b	230	Methanone, (2-amino-5-chlorophenyl)phenyl-	87	719-59-5		
4834	31,99	0,62 – 2,5 d	168,193	unbekannt				
5031	33,08	2,68 – 10,7 b	159	Benzene, 1,1'-sulfonylbis[4-chloro-	86	80-07-9		
5089	33,40	1,26 – 5,0 b	112	unbekannt				

Auftraggeber
Projekt
Auftrag Nr.
Datum

HPC Harress Pickel Consult AG
U II "Kesslergrube", Grenzach-Wyhlen
A10-00306
18.10.2010

Anhang: **33**

Probenbezeichnung: KE 31				Int. Probennummer: M1002-01645			
Interne Standards							
Nr.	Name des Internen Standards (I.S.)	Konzentration (µg/l)	Wiederfindung (%)	Bemerkungen			
a	Anilin d5	0,99	13				
b	Nitrobenzol d5	0,99	79				
c	Naphthalin d8	0,99	76				
d	1-Chlorododecan	0,99	105				
e	Acenaphthen d10	2,47	-	Volumen Standard			
Nachgewiesene Substanzen							
Scan	RT (Min.)	µg/l (I.S. b/c/d)	Massen m/z (fett = Basispeak)	Name, Trivialname oder IUPAC	% Fit	CAS-Nr.	Bemerkungen
5261	34,36	1,62 – 6,5 d	136,236,281	unbekannt	90	791-28-6	Möglicherweise 1,1'-Bis-Isoquinolin, MS hat sehr wenig Info
5417	35,22	0,57 – 2,3 d	135,161,179,207,208,253	unbekannt			
5471	35,52	3,01 – 12,0 b	193	unbekannt			
5541	35,91	1,80 – 7,2 d	178	unbekannt			
5750	37,07	1,47 – 5,9 b	277	Triphenylphosphine oxide			
5915	37,98	0,14 – 0,6 c	286	[1,1'-Binaphthalene]-2,2'-diol	82	602-09-5	
5976	38,32	0,37 – 1,5 c	255,256	unbekannt			

Auftraggeber
Projekt
Auftrag Nr.
Datum

HPC Harress Pickel Consult AG
U II "Kesslergrube", Grenzach-Wyhlen
A10-00306
18.10.2010

Anhang: **33**

Probenbezeichnung: **KE 31** Int. Probennummer: **M1002-01645**

Interne Standards				
Nr.	Name des Internen Standards (I.S.)	Konzentration (µg/l)	Wiederfindung (%)	Bemerkungen
a	Anilin d5	0,99	13	
b	Nitrobenzol d5	0,99	79	
c	Naphthalin d8	0,99	76	
d	1-Chlorododecan	0,99	105	
e	Acenaphthen d10	2,47	-	Volumen Standard

Nachgewiesene Substanzen								
Scan	RT (Min.)	µg/l (I.S. b/c/d)	Massen m/z (fett = Basispeak)	Name, Trivialname oder IUPAC	% Fit	CAS-Nr.	Bemerkungen	
1907	15,77	0,27 – 1,1 d	148 66,79,91	unbekannt				
2192	17,35	0,48 – 1,9 d	144 133,134,179	unbekannt				
2456	18,81	0,22 – 0,9 d	160 108,153,175	unbekannt				
2803	20,73	0,26 – 1,0 d	92 121,122,164	unbekannt				
3458	24,36	0,18 – 0,7 d	137 109,136,207	unbekannt				
3533	24,78	0,37 – 1,5 d	59 43,71,303	unbekannt				
3904	26,84	0,34 – 1,4 d	144 94,106,152	unbekannt				
4876	32,22	0,35 – 1,4 d	91 119,135,162	unbekannt				
4922	32,48	0,24 – 0,9 d	274 204,231,232	unbekannt				
4947	32,62	0,39 – 1,6 d	165 137,166,193	unbekannt				
5292	34,53	0,17 – 0,7 d	193 194,249,323	unbekannt				

Aufkonzentrierungsfaktor: 560
Bestimmungsgrenze (IS Naphthalin): 0.2 µg/l

Auftraggeber
Projekt
Auftrag Nr.
Datum

HPC Harress Pickel Consult AG
U II "Kesslergrube", Grenzach-Wyhlen
A10-00306
15.04.2010

Anhang: **34**

Probenbezeichnung: **CI 36** Int. Probennummer: **M1002-01646**

Interne Standards				
Nr.	Name des Internen Standards (I.S.)	Konzentration (µg/l)	Wiederfindung (%)	Bemerkungen
a	Anilin d5	1,04	15	Volumen Standard
b	Nitrobenzol d5	1,04	98	
c	Naphthalin d8	1,04	95	
d	1-Chlorododecan	1,04	80	
e	Acenaphthen d10	2,59	-	

Nachgewiesene Substanzen							
Scan	RT (Min.)	µg/l (I.S. b/c/d)	Massen m/z (fett = Basispeak)	Name, Trivialname oder IUPAC	% Fit	CAS-Nr.	Bemerkungen
2188	17,32	0,10 – 0,4 b	161 ,163	Benzenamine, 2,3-dichloro-	83	608-27-5	* oder Isomer
2528	19,21	0,21 – 0,9 b	109, 151	2,4,7,9-Tetramethyl-e-decyn-4,7-diol	82	126-86-3	Surfynol
2824	20,85	0,15 – 0,6 b	122, 138 ,167	unbekannt			* Hinweis auf Pyrrolverbindung
2994	21,79	0,19 – 0,7 b	111 ,175,190	Benzene, 1-chloro-4-(methylsulfonyl)	80	98-57-7	*
3022	21,95	0,08 – 0,3 d	83, 140 ,155	Methylpyrrolon	86	125-64-4	*
3221	23,05	0,21 – 0,8 b	101 ,143,245,287	unbekannt			Zuckerähnlich
3883	26,72	0,19 – 0,8 b	93,190, 232	unbekannt			Aromat, N-haltig, MW?
3916	26,90	0,11 – 0,4 b	173 ,201,217,246	unbekannt			O-haltig, polyzyklisch
4177	28,35	0,26 – 1,1 b	90,126, 205 ,207	unbekannt			2-Chlor-4-(Methylsulfonyl)anilin oder Isomer, MW 205
4348	29,30	0,22 – 0,9 b	215 ,230	unbekannt			Propylphenazon + i
4429	29,75	0,23 – 0,9 d	155, 183	3-Dibenzofuranamine	83	4106-66-5	* oder Isomer
4462	29,93	0,18 – 0,7 b	155, 183	unbekannt			*Hinweis auf aromatische Verbindung
4712	31,31	0,15 – 0,6 d	221	Heptabarbitol	91	509-86-4	*
5303	34,59	0,16 – 0,6 b	209, 281	unbekannt			* Hinweis auf aromatische Verbindung
5805	37,37	0,14 – 0,6 d	277	Triphenylphosphine oxide	87	791-28-6	*
6250	39,84	0,07 – 0,3 d	101, 113	unbekannt			Zuckerähnlich

Aufkonzentrierungsfaktor: 640
Bestimmungsgrenze (IS Naphthalin): 0.05 µg/l

Auftraggeber
Projekt
Auftrag Nr.
Datum

HPC Harress Pickel Consult AG
U II "Kesslergrube", Grenzach-Wyhlen
A10-00306
18.10.2010

Anhang: **35**

Probenbezeichnung: KE 41					Int. Probennummer: M1002-01647		
Interne Standards							
Nr.	Name des Internen Standards (I.S.)		Konzentration (µg/l)	Wiederfindung (%)		Bemerkungen	
a	Anilin d5		75	25			
b	Nitrobenzol d5		75	74			
c	Naphthalin d8		75	72			
d	1-Chlorododecan		75	50			
e	Acenaphthen d10		189	-		Volumen Standard	
Nachgewiesene Substanzen							
Scan	RT (Min.)	µg/l (I.S. b/c/d)	Massen m/z (fett = Basispeak)	Name, Trivialname oder IUPAC	% Fit	CAS-Nr.	Bemerkungen
772	9,48	86 – 343 d	43,83,141	unbekannt	84	112-05-0	Hinweis auf alkyliertes Cyclohexen Hinweis auf Terpenoid Verbindung
1092	11,25	597 – 2387 d	67,81,82	unbekannt			
1610	14,12	41 – 165 d	67,82,110,140	unbekannt			
1897	15,71	39 – 154 d	73	Nonanoic acid			
2195	17,36	38 – 151 d	106.134,135,179	unbekannt	85	20880-92-6	
3106	22,41	17 – 66 d	245	á-D-Fructopyranose, 2,3:4,5-bis-O-(1-methylethylidene)-			
3142	22,61	219 – 877 d	108	Pyrrole-3-carboxylic acid, 4-formyl-5-methyl-, ethyl ester			
3438	24,25	161 – 644 d	259	2,2,7,7-Tetramethyl-tetrahydro-bis[1,3]dioxolo[4,5-b;4',5'-d]pyran-3a-carboxylic acid			
3861	26,60	37 – 146 d	173,201,217,246	unbekannt	88	2033-30-9	Ev. Coumarin Verbindung
3947	27,07	36 – 143 d	135,181,210	unbekannt			
4255	28,78	14 – 57 b	162	5,6-Dimethyl-2-benzimidazolinone			
4843	32,04	250 – 1000 d	73	Octadecanoic acid			
4941	32,58	34 – 138 d	57,71,166,193	unbekannt	89	57-11-4	
5368	34,95	31 – 126 d	168,194,268	unbekannt			
5467	35,50	90 – 362 d	193,323	unbekannt			

Auftraggeber
Projekt
Auftrag Nr.
Datum

HPC Harress Pickel Consult AG
U II "Kesslergrube", Grenzach-Wyhlen
A10-00306
18.10.2010

Anhang: **35**

Probenbezeichnung: KE 41						Int. Probennummer: M1002-01647				
Interne Standards										
Nr.		Name des Internen Standards (I.S.)			Konzentration (µg/l)		Wiederfindung (%)		Bemerkungen	
a		Anilin d5			75		25			
b		Nitrobenzol d5			75		74			
c		Naphthalin d8			75		72			
d		1-Chlorododecan			75		50			
e		Acenaphthen d10			189		-			
Volumen Standard										
Nachgewiesene Substanzen										
Scan	RT (Min.)	µg/l (I.S. b/c/d)			Massen m/z (fett = Basispeak)		Name, Trivialname oder IUPAC	% Fit	CAS-Nr.	Bemerkungen
2019	16,39	16	–	66 d	169	43,81,109	unbekannt			
2391	18,45	20	–	80 d	109	43,82,152	unbekannt			
3023	21,95	16	–	63 d	169	69,95,125	unbekannt			
3673	25,56	15	–	62 d	150	73,149,195	unbekannt			
3990	27,31	19	–	76 d	149	121,150,166	unbekannt			
4072	27,77	18	–	73 d	137	109,183,198	unbekannt			
4606	30,73	17	–	66 d	95	43,109,123	unbekannt			
4673	31,10	16	–	66 d	71	43,57,85	unbekannt			
5290	34,52	17	–	70 d	193	194,249,323	unbekannt			

Aufkonzentrierungsfaktor: 13
Bestimmungsgrenze (IS Naphthalin): 5 µg/l

Auftraggeber
Projekt
Auftrag Nr.
Datum

HPC Harress Pickel Consult AG
U II "Kesslergrube", Grenzach-Wyhlen
A10-00306
18.10.2010

Anhang: **36**

Probenbezeichnung: KE 32				Int. Probennummer: M1002-01648				
Interne Standards								
Nr.	Name des Internen Standards (I.S.)		Konzentration (µg/l)	Wiederfindung (%)		Bemerkungen		
a	Anilin d5		1,07	14		Volumen Standard		
b	Nitrobenzol d5		1,07	60				
c	Naphthalin d8		1,07	65				
d	1-Chlorododecan		1,07	53				
e	Acenaphthen d10		2,68	-				
Nachgewiesene Substanzen								
Scan	RT (Min.)	µg/l (I.S. b/c/d)	Massen m/z (fett = Basispeak)	Name, Trivialname oder IUPAC	% Fit	CAS-Nr.	Bemerkungen	
652	8,81	0,25 – 1,0 b	146	Benzene, 1,4-dichloro-	88	106-46-7	Dichlorbenzol + Interferenz m/z 141	
772	9,48	0,46 – 1,8 d	43,83,141	unbekannt				
1089	11,23	1,35 – 5,4 d	81	unbekannt			Ein substituiertes Cyclohexen	
1360	12,74	1,95 – 7,8 b	110	Phenol, 2-ethoxy-	89	94-71-3	Phenobarbitalmetabolit	
1801	15,18	0,43 – 1,7 b	117	(+)-2-Phenylbutyronitrile	87	69350-73-8		
1966	16,09	1,26 – 5,1 b	141	Benzenamine, 3-chloro-2-methyl-	89	87-60-5		
1996	16,26	1,19 – 4,8 b	141	Benzenamine, 3-chloro-2-methyl-	85	87-60-5		
2129	17,00	0,69 – 2,7 b	161	Benzenamine, 3,5-dichloro-	89	626-43-7		
2191	17,34	1,44 – 5,7 b	144	3,5-Dimethyl-4-(2-furyl)pyridine	80	78563-72-1	Störung durch Koelution	
2357	18,26	0,32 – 1,3 b	77	Sulfone, methyl phenyl	85	3112-85-4	4-Formyl-5-methyl-pyrol-3-carboxylsäureethylester oder Isomer, CAS 332414-41-2, F/RF 78/84%	
2395	18,47	5,84 – 23,4 b	135	Phenol, 4-(1,1-dimethylpropyl)-	93	80-46-6		
2454	18,80	0,58 – 2,3 b	160	1H-Isindole, 3-methoxy-4,7-dimethyl-	82	100813-60-3		
2474	18,91	0,90 – 3,6 d	151	2,4,7,9-Tetramethyl-5-decyn-4,7-diol	84	126-86-3		
2770	20,55	1,43 – 5,7 b	91,138,173	unbekannt				
2902	21,28	0,40 – 1,6 c	153	1-Naphthalenamine	89	134-32-7	4-Hydroxy-2,6-Dimethyl-Nikotinsäureethylester (Wiley9) oder isomer passt gut, div Interferenzen, F/RF 65/82%, MW 195	
2937	21,48	3,26 – 13,0 b	111	Benzene, 1-chloro-4-(methylsulfonyl)-	80	98-57-7		
3104	22,40	2,56 – 10,2 b	116,168,169,205	unbekannt				
3135	22,57	0,91 – 3,7 b	136,152,181	unbekannt				
3278	23,37	5,33 – 21,3 b	91	Benzene, (1,1-diethylpropyl)-	84	4170-84-7		
3360	23,82	1,97 – 7,9 b	91	Benzenesulfonamide, 4-methyl	84	70-55-3	Gute Übereinst. mit 1-Phenyl-3-Methyl-4-Hydroxy-4-(Prop-2-yl)-2,5-Dihydropyrazol-5-on (Wiley9), F/RF 86/94%	
3404	24,07	0,76 – 3,0 d	144,169	unbekannt				
3716	25,79	2,84 – 11,3 b	150,195	unbekannt				
3743	25,94	0,28 – 1,1 d	107,108,134,152,197	unbekannt				
3773	26,11	0,99 – 4,0 d	174,216	unbekannt				
3825	26,40	2,27 – 9,1 d	78,190,232	unbekannt				
3859	26,59	0,36 – 1,4 d	173,201,246	unbekannt				
3936	27,01	0,42 – 1,7 d	135,154,182	unbekannt				
4011	27,43	3,90 – 15,6 b	189	Glutethimide	89	77-21-4		

Auftraggeber
Projekt
Auftrag Nr.
Datum

HPC Harress Pickel Consult AG
U II "Kesslergrube", Grenzach-Wyhlen
A10-00306
18.10.2010

Anhang: **36**

Probenbezeichnung: **KE 32** Int. Probennummer: **M1002-01648**

Interne Standards				
Nr.	Name des Internen Standards (I.S.)	Konzentration (µg/l)	Wiederfindung (%)	Bemerkungen
a	Anilin d5	1,07	14	Volumen Standard
b	Nitrobenzol d5	1,07	60	
c	Naphthalin d8	1,07	65	
d	1-Chlorododecan	1,07	53	
e	Acenaphthen d10	2,68	-	

Nachgewiesene Substanzen							
Scan	RT (Min.)	µg/l (I.S. b/c/d)	Massen m/z (fett = Basispeak)	Name, Trivialname oder IUPAC	% Fit	CAS-Nr.	Bemerkungen
4052	27,66	2,18 – 8,7 b	188	Antipyrine	91	60-80-0	MS zu wenig Information, heterozyklischer, polyzyklischer Aromat
4143	28,16	8,35 – 33,4 d	202	unbekannt			
4226	28,62	0,43 – 1,7 b	162	5,6-Dimethyl-2-benzimidazolinone	87	2033-30-9	
4274	28,89	1,36 – 5,5 b	142	Benzenamine, 2-chloro-4-(methylsulfonyl)-	86	13244-35-4	a,a-Bis(2-cyanoethyl)benzylcyanid (wiley9), F/RF 76/94%
4291	28,98	5,71 – 22,9 b	215	Propyphenazone	92	479-92-5	
4372	29,43	0,33 – 1,3 b	183	3-Dibenzofuranamine	82	4106-66-5	
4543	30,38	1,09 – 4,3 d	169	unbekannt			
4579	30,58	0,94 – 3,8 b	230	Methanone, (2-amino-5-chlorophenyl)phenyl-	88	719-59-5	
4654	30,99	0,35 – 1,4 d	221	Heptabarbital	82	509-86-4	
4831	31,98	1,42 – 5,7 b	168	2-Aminodiphenylsulfone	87	4273-98-7	
4873	32,21	0,64 – 2,5 b	91,135,162	unbekannt			
5029	33,07	3,18 – 12,7 b	159	Benzene, 1,1'-sulfonylbis[4-chloro-	87	80-07-9	
5087	33,39	0,98 – 3,9 d	112	unbekannt			
5251	34,30	1,33 – 5,3 d	122,136,209,236,281	unbekannt			
5411	35,19	0,41 – 1,6 d	135,162,207,253,282	unbekannt			
5468	35,51	0,99 – 3,9 d	193	unbekannt			
5521	35,80	1,54 – 6,1 d	178	unbekannt			
5631	36,41	0,29 – 1,2 d	99	Phosphoric acid, tris(2-ethylhexyl) ester	84	78-42-2	
5744	37,04	1,68 – 6,7 b	277	Triphenylphosphine oxide	91	791-28-6	
5911	37,96	0,16 – 0,6 c	71,286	unbekannt			
5973	38,31	0,66 – 2,6 d	255,256	unbekannt			
6436	40,87	0,26 – 1,0 d	261,279,306,336	unbekannt			
6946	43,70	0,44 – 1,8 d	285,312,342	unbekannt			

Auftraggeber
Projekt
Auftrag Nr.
Datum

HPC Harress Pickel Consult AG
U II "Kesslergrube", Grenzach-Wyhlen
A10-00306
18.10.2010

Anhang: **36**

Probenbezeichnung: **KE 32** Int. Probennummer: **M1002-01648**

Interne Standards				
Nr.	Name des Internen Standards (I.S.)	Konzentration (µg/l)	Wiederfindung (%)	Bemerkungen
a	Anilin d5	1,07	14	
b	Nitrobenzol d5	1,07	60	
c	Naphthalin d8	1,07	65	
d	1-Chlorododecan	1,07	53	
e	Acenaphthen d10	2,68	-	
				Volumen Standard

Nachgewiesene Substanzen							
Scan	RT (Min.)	µg/l (I.S. b/c/d)	Massen m/z (fett = Basispeak)	Name, Trivialname oder IUPAC	% Fit	CAS-Nr.	Bemerkungen
1906	15,76	0,19 – 0,8 d	148 66,79,91	unbekannt			
2800	20,72	0,22 – 0,9 d	92 121,122,164	unbekannt			
2967	21,64	0,11 – 0,4 d	140 83,110,155	unbekannt			
3006	21,86	0,11 – 0,4 d	96 69,167,169	unbekannt			
3163	22,73	0,08 – 0,3 d	245 43,135,171	unbekannt			
3435	24,24	0,13 – 0,5 d	259 43,59,171	unbekannt			
3616	25,24	0,19 – 0,7 d	93 43,92,186	unbekannt			
3638	25,36	0,14 – 0,6 d	134 166,177,223	unbekannt			
3671	25,55	0,25 – 1,0 d	155 91,150,212	unbekannt			
3803	26,28	0,18 – 0,7 d	136 91,150,178	unbekannt			
3874	26,67	0,16 – 0,6 d	189 104,133,161	unbekannt			
3975	27,23	0,13 – 0,5 d	221 43,161,203	unbekannt			
4099	27,92	0,12 – 0,5 d	235 190,207,236	unbekannt			
4171	28,32	0,07 – 0,3 d	125 184,202,241	unbekannt			
4199	28,47	0,17 – 0,7 d	217 189,216,290	unbekannt			
4241	28,70	0,15 – 0,6 d	185 135,170,226	unbekannt			
4421	29,70	0,12 – 0,5 d	235 207,208,281	unbekannt			
4564	30,50	0,18 – 0,7 d	150 134,148,178	unbekannt			
4788	31,74	0,10 – 0,4 d	144 130,145,195	unbekannt			
6538	41,44	0,13 – 0,5 d	98 83,207,253	unbekannt			

Aufkonzentrierungsfaktor: 620
Bestimmungsgrenze (IS Naphthalin): 0.1 µg/l

Auftraggeber
Projekt
Auftrag Nr.
Datum

HPC Harress Pickel Consult AG
U II "Kesslergrube", Grenzach-Wyhlen
A10-00306
15.04.2010

Anhang: **37**

Probenbezeichnung: CI 33				Int. Probennummer: M1002-01649			
Interne Standards							
Nr.	Name des Internen Standards (I.S.)		Konzentration (µg/l)	Wiederfindung (%)		Bemerkungen	
a	Anilin d5		1,03	14			
b	Nitrobenzol d5		1,03	98			
c	Naphthalin d8		1,03	106			
d	1-Chlorododecan		1,03	92			
e	Acenaphthen d10		2,57	-		Volumen Standard	
Nachgewiesene Substanzen							
Scan	RT (Min.)	µg/l (I.S. b/c/d)	Massen m/z (fett = Basispeak)	Name, Trivialname oder IUPAC	% Fit	CAS-Nr.	Bemerkungen
714	9,15	0,11 – 0,4 b	146, 148	Benzene, 1,4-dichloro-	85	106-46-7	* oder Isomer
3221	23,05	0,08 – 0,3 d	245	2,2,5,5-Tetramethyldihydro-1,3,4,6,8-pentaoxacyclopenta(a)inden-3a-yl)methanol,	82	NA	*
4114	28,00	0,07 – 0,3 d	69,83,97	unbekannt			Kettig, O-Funktion, verm. Biogen
4178	28,35	0,13 – 0,5 b	90,126,205	unbekannt			Ein chloriertes aromatisches Sulfonamid, MW 205
4435	29,78	0,06 – 0,3 d	263, 278	2,5-di-tert. Butyl-4-hydroxyphenylpropionic acid	80	20170-32-5	*
4542	30,37	0,09 – 0,3 d	256	Schwefel S8	88	10544-50-0	*

Aufkonzentrierungsfaktor: 610
Bestimmungsgrenze (IS Naphthalin): 0.05 µg/l

Auftraggeber
Projekt
Auftrag Nr.
Datum

HPC Harress Pickel Consult AG
U II "Kesslergrube", Grenzach-Wyhlen
A10-00306
15.04.2010

Anhang: **38**

Probenbezeichnung: KE 26				Int. Probennummer: M1002-01650			
Interne Standards							
Nr.	Name des Internen Standards (I.S.)	Konzentration (µg/l)	Wiederfindung (%)		Bemerkungen		
a	Anilin d5	1,07	21				
b	Nitrobenzol d5	1,07	81				
c	Naphthalin d8	1,07	84				
d	1-Chlorododecan	1,07	53				
e	Acenaphthen d10	2,68	-		Volumen Standard		
Nachgewiesene Substanzen							
Scan	RT (Min.)	µg/l (I.S. b/c/d)	Massen m/z (fett = Basispeak)	Name, Trivialname oder IUPAC	% Fit	CAS-Nr.	Bemerkungen
980	10,63	0,13 – 0,5 d	106,107	unbekannt	83	883-93-2	Ein Tetrachlorbutadien + Interferenz
3908	26,86	0,87 – 3,5 d	118,209,224	unbekannt			Könnte Homolog zu 5,6,11,12-Tetrahydrodibenz(b,f)azocin sein CAS 5697-88-1 + Methylengruppe
4326	29,18	0,23 – 0,9 b	211	Benzothiazole, 2-phenyl-			Ist Benzulfanilid ? Interferenz durch Alkansäureester (auch in Blindprobe)
4468	29,97	0,67 – 2,7 b	92,168,233	unbekannt			
4689	31,19	0,12 – 0,5 b	221,236,268	unbekannt			

Aufkonzentrierungsfaktor: 520
Bestimmungsgrenze (IS Naphthalin): 0.05 µg/l

Auftraggeber
Projekt
Auftrag Nr.
Datum

HPC Harress Pickel Consult AG
U II "Kesslergrube", Grenzach-Wyhlen
A10-00306
15.04.2010

Anhang: **39**

Probenbezeichnung: P 15					Int. Probennummer: M1002-01651					
Interne Standards										
Nr.	Name des Internen Standards (I.S.)					Konzentrati on (µg/l)	Wiederfindung (%)	Bemerkungen		
a	Anilin d5					1,09	15			
b	Nitrobenzol d5					1,09	114			
c	Naphthalin d8					1,09	112			
d	1-Chlorododecan					1,09	55			
e	Acenaphthen d10					2,72	-	Volumen Standard		
Nachgewiesene Substanzen										
Scan	RT (Min.)	µg/l (I.S. b/c/d)				Massen m/z (fett = Basispeak)	Name, Trivialname oder IUPAC	% Fit	CAS-Nr.	Bemerkungen
3215	23,02	0,15	–	0,6 b	168	105,153	unbekannt			Hinweis auf N-haltige, aromatische Verbindung
4543	30,38	0,05	–	0,2 c	160	64,128,256	Sulfur S8		10544-50-0	

Aufkonzentrierungsfaktor: 540
Bestimmungsgrenze (IS Naphthalin): 0.05 µg/l

Auftraggeber
Projekt
Auftrag Nr.
Datum

HPC Harress Pickel Consult AG
U II "Kesslergrube", Grenzach-Wyhlen
A10-00306
18.10.2010

Anhang: **40**

Probenbezeichnung: **KE 20** Int. Probennummer: **M1002-01652**

Interne Standards

Nr.	Name des Internen	Konzentration	Wiederfindung (%)	Bemerkungen
a	Anilin d5	1,04	17	
b	Nitrobenzol d5	1,04	86	
c	Naphthalin d8	1,04	83	
d	1-Chlorododecan	1,04	141	
e	Acenaphthen d10	2,59	-	Volumen Standard

Nachgewiesene Substanzen

Scan	RT (Min.)	µg/l (I.S. b/c/d)	Massen m/z (fett = Basispeak)	Name, Trivialname oder IUPAC	% Fit	CAS-Nr.	Bemerkungen
654	8,82	0,5 – 2,1 b	146	Benzene, 1,4-dichloro-	87	106-46-7	
771	9,47	1,0 – 3,9 b	146	Benzene, 1,4-dichloro-	90	106-46-7	
1091	11,24	0,9 – 3,4 d	67,81,82	unbekannt			Hinweis auf alkyliertes Cyclohexen
1362	12,75	3,2 – 12,6 b	110	Phenol, 2-ethoxy-	89	94-71-3	
1692	14,58	0,7 – 2,7 b	134	Benzenamine, N,N-diethyl-	85	91-66-7	
1832	15,35	3,9 – 15,7 b	135	Benzenamine, 2,4,6-trimethyl-	93	88-05-1	
1869	15,56	0,8 – 3,1 b	158	4-Chloro-2-methylthiophenol	82	17178-01-7	
2131	17,01	2,3 – 9,1 b	161	Benzenamine, 3,5-dichloro-	86	626-43-7	
2398	18,49	2,1 – 8,4 b	135	Phenol, 4-(1,1-dimethylpropyl)-	85	80-46-6	
2523	19,18	2,7 – 10,8 d	135,150	unbekannt			
2720	20,27	1,2 – 4,8 c	153	Acenaphthene	88	83-32-9	
2806	20,75	4,3 – 17,3 d	123,137,180	unbekannt			
2905	21,30	1,4 – 5,8 c	143	1-Naphthalenamine	92	134-32-7	
2983	21,73	1,9 – 7,5 d	140	Methyprylon	86	125-64-4	
3138	22,59	15,1 – 60,2 b	137,151,208	unbekannt			Hinweis auf Aromat
3160	22,71	3,7 – 14,9 b	130,165,166,168	unbekannt			
3369	23,87	2,7 – 10,9 d	209	unbekannt			
3420	24,15	3,0 – 11,8 d	125	unbekannt			
3729	25,87	5,6 – 22,3 d	61,89	unbekannt			
3754	26,00	2,9 – 11,6 d	150,178,207,252	unbekannt			
3779	26,14	7,0 – 28,1 d	77,174,216	unbekannt			
3840	26,48	10,1 – 40,3 d	93,190,232	unbekannt			
3866	26,63	5,1 – 20,2 b	137,165,208	unbekannt			
3924	26,95	3,2 – 12,6 d	123,246	unbekannt			
4148	28,19	3,9 – 15,4 d	110,181,202	unbekannt			
4300	29,03	23,3 – 93,1 b	215	Propyphenazone	92	479-92-5	
4377	29,46	14,1 – 56,4 b	155,183	unbekannt			
4411	29,65	4,5 – 18,0 d	155,183	unbekannt			Isomer zu Verbindung Scan 4377
4481	30,03	5,8 – 23,2 d	255	Cyclic octaatomic sulfur	87	10544-50-0	
4555	30,44	11,5 – 45,8 b	142,148,169,192	unbekannt			
4589	30,63	15,3 – 61,2 b	230	Methanone, (2-amino-5-chlorophenyl)phenyl-	93	719-59-5	
4614	30,77	8,0 – 32,2 d	165,181,210	unbekannt			
4708	31,29	5,4 – 21,7 d	219,253	unbekannt			
4795	31,77	2,2 – 8,9 b	165,193,235	unbekannt			
5034	33,10	9,2 – 36,6 b	159	Benzene, 1,1'-sulfonylbis[4-chloro-	90	80-07-9	
5157	33,78	5,1 – 20,4 b	165,195,234,249	unbekannt			
5768	37,17	46,0 – 184,1 b	277	Triphenylphosphine oxide	92	791-28-6	
5842	37,58	2,7 – 10,8 b	242	Nordazepam	80	1088-11-5	

Auftraggeber
Projekt
Auftrag Nr.
Datum

HPC Harress Pickel Consult AG
U II "Kesslergrube", Grenzach-Wyhlen
A10-00306
18.10.2010

Anhang: **40**

Probenbezeichnung: **KE 20** Int. Probennummer: **M1002-01652**

Interne Standards

Nr.	Name des Internen	Konzentration	Wiederfindung (%)	Bemerkungen
a	Anilin d5	1,04	17	
b	Nitrobenzol d5	1,04	86	
c	Naphthalin d8	1,04	83	
d	1-Chlorododecan	1,04	141	
e	Acenaphthen d10	2,59	-	Volumen Standard

Nachgewiesene Substanzen

Scan	RT (Min.)	µg/l (I.S. b/c/d)	Massen m/z (fett = Basispeak)	Name, Trivialname oder IUPAC	% Fit	CAS-Nr.	Bemerkungen
986	10,66	0,6 – 2,2 d	71 43,45,73	unbekannt			
1574	13,92	0,3 – 1,1 d	127 99,125,129	unbekannt			
1655	14,37	0,2 – 0,8 d	150 79,107,122	unbekannt			
1709	14,67	0,3 – 1,1 d	101 98,129,144	unbekannt			
1776	15,04	0,2 – 0,7 d	97 69,125,140	unbekannt			
1811	15,23	0,3 – 1,2 d	152 43,95,124	unbekannt			
1901	15,73	0,1 – 0,5 d	136 43,95,109	unbekannt			
1961	16,07	0,6 – 2,2 d	97 57,69,113	unbekannt			
1985	16,20	0,4 – 1,7 d	135 109,126,137	unbekannt			
2089	16,78	0,3 – 1,4 d	139 43,94,154	unbekannt			
2154	17,14	0,6 – 2,2 d	109 43,124,152	unbekannt			
2172	17,24	0,1 – 0,5 d	177 83,151,152	unbekannt			
2192	17,35	0,3 – 1,3 d	144 116,134,173	unbekannt			
2314	18,02	0,3 – 1,1 d	101 43,116,172	unbekannt			
2359	18,27	0,5 – 1,9 d	165 110,151,180	unbekannt			
2424	18,63	2,1 – 8,4 d	180 123,124,152	unbekannt			
2447	18,76	1,3 – 5,3 d	98 43,101,116	unbekannt			
2484	18,97	0,9 – 3,4 d	95 43,134,149	unbekannt			
2508	19,10	0,7 – 2,7 d	82 109,137,152	unbekannt			
2611	19,67	0,2 – 1,0 d	141 109,121,156	unbekannt			
2654	19,91	0,2 – 0,8 d	140 43,125,151	unbekannt			
2754	20,46	0,8 – 3,3 d	192 43,64,71	unbekannt			
2787	20,64	2,0 – 8,2 d	118 119,159,174	unbekannt			
2822	20,84	0,2 – 0,6 d	138 55,69,139	unbekannt			
2849	20,99	0,6 – 2,5 d	95 43,109,121	unbekannt			
2869	21,10	0,5 – 1,8 d	141 83,98,126	unbekannt			
2947	21,53	0,5 – 1,9 d	137 69,97,183	unbekannt			
2961	21,61	0,4 – 1,6 d	97 69,113,137	unbekannt			
2999	21,82	1,1 – 4,6 d	148 105,120,149	unbekannt			
3027	21,97	0,3 – 1,0 d	151 118,119,135	unbekannt			
3066	22,19	0,9 – 3,6 d	98 43,91,134	unbekannt			
3109	22,43	1,4 – 5,7 d	169 43,109,168	unbekannt			
3178	22,81	0,3 – 1,2 d	167 43,109,135	unbekannt			
3213	23,01	0,4 – 1,7 d	169 167,168,181	unbekannt			
3241	23,16	0,6 – 2,4 d	105 77,181,182	unbekannt			
3254	23,23	0,7 – 2,8 d	182 69,95,181	unbekannt			
3285	23,40	0,5 – 1,8 d	91 105,147,148	unbekannt			
3331	23,66	1,0 – 3,8 d	139 152,153,169	unbekannt			
3453	24,34	0,4 – 1,5 d	43 93,109,202	unbekannt			
3483	24,50	0,5 – 1,9 d	148 105,133,147	unbekannt			
3506	24,63	0,5 – 1,9 d	135 43,178,203	unbekannt			
3538	24,81	1,7 – 6,7 d	125 43,97,183	unbekannt			

Auftraggeber
Projekt
Auftrag Nr.
Datum

HPC Harress Pickel Consult AG
U II "Kesslergrube", Grenzach-Wyhlen
A10-00306
18.10.2010

Anhang: **40**

Probenbezeichnung: **KE 20** Int. Probennummer: **M1002-01652**

Interne Standards				
Nr.	Name des Internen	Konzentration	Wiederfindung (%)	Bemerkungen
a	Anilin d5	1,04	17	
b	Nitrobenzol d5	1,04	86	
c	Naphthalin d8	1,04	83	
d	1-Chlorododecan	1,04	141	
e	Acenaphthen d10	2,59	-	Volumen Standard

Nachgewiesene Substanzen							
Scan	RT (Min.)	µg/l (I.S. b/c/d)	Massen m/z (fett = Basispeak)	Name, Trivialname oder IUPAC	% Fit	CAS-Nr.	Bemerkungen
3558	24,92	0,5 – 1,9 d	185 135,143,200	unbekannt			
3577	25,02	0,7 – 2,9 d	82 110,137,179	unbekannt			
3597	25,13	0,7 – 2,7 d	183 154,156,182	unbekannt			
3614	25,23	1,6 – 6,3 d	123 119,133,207	unbekannt			
3643	25,39	0,3 – 1,2 d	134 43,151,184	unbekannt			
3661	25,49	0,4 – 1,4 d	151 43,150,159	unbekannt			
3674	25,56	0,3 – 1,3 d	137 136,153,204	unbekannt			
3814	26,34	0,3 – 1,4 d	136 135,164,206	unbekannt			
3899	26,81	0,2 – 0,7 d	43 105,123,232	unbekannt			
3984	27,28	0,1 – 0,6 d	43 149,178,235	unbekannt			
4013	27,44	1,8 – 7,4 d	189 117,121,149	unbekannt			
4046	27,62	1,7 – 6,7 d	181 164,179,196	unbekannt			
4077	27,79	1,0 – 4,2 d	109 169,229,244	unbekannt			
4114	28,00	0,3 – 1,2 d	178 137,150,179	unbekannt			
4176	28,34	0,8 – 3,2 d	179 137,207,280	unbekannt			
4218	28,58	0,2 – 0,6 d	43 69,95,183	unbekannt			
4238	28,69	0,9 – 3,4 d	155 97,127,231	unbekannt			
4330	29,20	0,2 – 1,0 d	211 43,179,208	unbekannt			
4350	29,31	0,2 – 0,6 d	207 43,162,179	unbekannt			
4459	29,91	0,5 – 1,9 d	133 103,177,192	unbekannt			
4521	30,26	0,5 – 1,9 d	148 135,147,192	unbekannt			
4636	30,89	0,6 – 2,4 d	71 43,57,69	unbekannt			
4671	31,09	0,3 – 1,0 d	144 43,121,145	unbekannt			
4768	31,62	1,0 – 4,1 d	197 43,143,270	unbekannt			
4817	31,90	0,3 – 1,1 d	72 43,69,113	unbekannt			
4831	31,97	1,2 – 4,8 d	140 43,71,168	unbekannt			
4882	32,26	0,2 – 0,7 d	91 119,135,162	unbekannt			
4915	32,44	2,0 – 7,8 d	179 165,178,223	unbekannt			
4954	32,66	0,5 – 2,0 d	180 55,278,293	unbekannt			
4983	32,82	0,2 – 0,6 d	195 43,166,167	unbekannt			
5072	33,31	0,4 – 1,7 d	180 152,181,209	unbekannt			
5126	33,61	0,4 – 1,6 d	188 43,201,244	unbekannt			
5190	33,96	2,4 – 9,7 d	194 43,166,180	unbekannt			
5253	34,31	0,6 – 2,2 d	183 69,81,165	unbekannt			
5311	34,63	0,4 – 1,6 d	233 133,205,249	unbekannt			
5341	34,80	0,4 – 1,7 d	227 165,182,183	unbekannt			
5367	34,94	0,5 – 2,1 d	135 69,95,150	unbekannt			
5381	35,02	0,3 – 1,2 d	180 194,208,222	unbekannt			
5416	35,22	0,2 – 0,8 d	147 43,56,150	unbekannt			
5438	35,34	1,2 – 5,0 d	147 150,223,224	unbekannt			
5476	35,55	0,7 – 2,6 d	193 147,150,194	unbekannt			

Auftraggeber
Projekt
Auftrag Nr.
Datum

HPC Harress Pickel Consult AG
U II "Kesslergrube", Grenzach-Wyhlen
A10-00306
18.10.2010

Anhang: **40**

Probenbezeichnung: KE 20				Int. Probennummer:		M1002-01652		
Interne Standards								
Nr.	Name des Internen	Konzentration	Wiederfindung (%)		Bemerkungen			
a	Anilin d5	1,04	17					
b	Nitrobenzol d5	1,04	86					
c	Naphthalin d8	1,04	83					
d	1-Chlorododecan	1,04	141					
e	Acenaphthen d10	2,59	-		Volumen Standard			
Nachgewiesene Substanzen								
Scan	RT (Min.)	µg/l (I.S. b/c/d)	Massen m/z (fett = Basispeak)		Name, Trivialname oder IUPAC	% Fit	CAS-Nr.	Bemerkungen
5572	36,08	1,2 – 4,6 d	135	121,136,270	unbekannt			
5613	36,31	0,6 – 2,5 d	123	95,124,137	unbekannt			
5630	36,40	0,5 – 2,0 d	123	95,124,137	unbekannt			
5733	36,97	0,3 – 1,3 d	192	43,164,220	unbekannt			
5926	38,04	0,3 – 1,1 d	286	43,181,257	unbekannt			
5978	38,33	0,3 – 1,1 d	255	181,256,257	unbekannt			
6001	38,46	0,5 – 2,1 d	222	180,194,236	unbekannt			
6119	39,11	0,2 – 0,8 d	193	43,164,165	unbekannt			
6194	39,53	0,2 – 0,8 d	319	43,180,207	unbekannt			
6268	39,94	0,6 – 2,4 d	152	168,169,335	unbekannt			
6324	40,25	1,1 – 4,4 d	254	253,255,256	unbekannt			
6410	40,73	0,3 – 1,2 d	69	81,95,137	unbekannt			
6584	41,69	0,5 – 1,9 d	240	205,239,297	unbekannt			
6725	42,47	0,2 – 0,9 d	113	44,282,284	unbekannt			
6796	42,87	0,1 – 0,6 d	191	207,287,288	unbekannt			
6886	43,36	0,7 – 2,7 d	182	140,154,207	unbekannt			
6918	43,54	1,0 – 4,0 d	182	140,154,207	unbekannt			
6952	43,73	1,8 – 7,1 d	182	140,207,321	unbekannt			

Aufkonzentrierungsfaktor: 540
Bestimmungsgrenze (IS Naphthalin): 0.2 µg/l

Auftraggeber
Projekt
Auftrag Nr.
Datum

HPC Harress Pickel Consult AG
U II "Kesslergrube", Grenzach-Wyhlen
A10-00306
18.10.2010

Anhang: **41**

Probenbezeichnung: KE 25					Int. Probennummer: M1002-01654		
Interne Standards							
Nr.	Name des Internen Standards (I.S.)		Konzentration (µg/l)	Wiederfindung (%)		Bemerkungen	
a	Anilin d5		1,05	16			
b	Nitrobenzol d5		1,05	73			
c	Naphthalin d8		1,05	81			
d	1-Chlorododecan		1,05	95			
e	Acenaphthen d10		2,63	-		Volumen Standard	
Nachgewiesene Substanzen							
Scan	RT (Min.)	µg/l (I.S. b/c/d)	Massen m/z (fett = Basispeak)	Name, Trivialname oder IUPAC	% Fit	CAS-Nr.	Bemerkungen
1092	11,25	0,8 – 3,0 d	81	unbekannt			Hinweis auf alkyliertes Cyclohexen
1833	15,36	0,5 – 2,1 b	135	Benzenamine, 2,4,6-trimethyl-	89	88-05-1	
1999	16,28	0,6 – 2,5 b	141	Benzenamine, 5-chloro-2-methyl-	89	95-79-4	
2131	17,01	0,9 – 3,5 b	161	Benzenamine, 3,5-dichloro-	83	626-43-7	
2155	17,14	0,3 – 1,2 d	109	2-Butanoyl-5-methylfuran	82	90673-55-5	
2192	17,35	0,9 – 3,6 b	116,134,144,173	unbekannt			
2398	18,49	1,2 – 4,9 b	135	Phenol, 4-(1,1-dimethylpropyl)-	86	80-46-6	Hinweis auf Aromat
2787	20,64	2,5 – 10,0 b	118,119,174	unbekannt			
2804	20,74	1,8 – 7,2 d	123,137,180	unbekannt			
2970	21,66	2,4 – 9,7 b	140	Methyprylon	90	125-64-4	
3108	22,42	1,2 – 4,9 d	169,205	unbekannt			
3136	22,58	5,5 – 21,9 b	137,151,208	unbekannt			
3159	22,71	1,3 – 5,0 b	130,165,166,168	unbekannt			
3280	23,38	2,6 – 10,3 b	91	Benzene, (1,1-diethylpropyl)-	81	4170-84-7	
3362	23,83	1,6 – 6,2 b	91	Benzenesulfonamide, 4-methyl-	82	70-55-3	
3752	25,99	1,5 – 6,1 d	150,178,207,252	unbekannt			
3775	26,12	2,5 – 10,1 d	77,174,216	unbekannt			
3827	26,41	4,7 – 19,0 d	93,190,232	unbekannt			
4042	27,60	1,1 – 4,4 d	179,181,196,225	unbekannt			
4143	28,16	2,4 – 9,8 d	77,110,202	unbekannt			
4293	28,99	12,1 – 48,2 b	215	Propyphenazone	92	479-92-5	
4373	29,44	2,9 – 11,6 d	155,183	unbekannt			
4407	29,62	2,3 – 9,1 d	155,183	unbekannt			
4547	30,40	1,7 – 6,9 d	142,169,223	unbekannt			
4582	30,59	4,2 – 16,8 b	230	Methanone, (2-amino-5-chlorophenyl)phenyl-	91	719-59-5	
4705	31,28	2,0 – 7,8 d	219,253,255	unbekannt			
5031	33,08	2,3 – 9,1 b	159	Benzene, 1,1'-sulfonylbis[4-chloro-	87	80-07-9	
5155	33,77	0,8 – 3,1 b	165,195,234	unbekannt			
5748	37,06	9,5 – 38,0 b	277	Triphenylphosphine oxide	91	791-28-6	

Auftraggeber
Projekt
Auftrag Nr.
Datum

HPC Harress Pickel Consult AG
U II "Kesslergrube", Grenzach-Wyhlen
A10-00306
18.10.2010

Anhang: **41**

Probenbezeichnung: KE 25						Int. Probennummer:		M1002-01654		
Interne Standards										
Nr.		Name des Internen Standards (I.S.)			Konzentration (µg/l)		Wiederfindung (%)		Bemerkungen	
a		Anilin d5			1,05		16			
b		Nitrobenzol d5			1,05		73			
c		Naphthalin d8			1,05		81			
d		1-Chlorododecan			1,05		95			
e		Acenaphthen d10			2,63		-			
Volumen Standard										
Nachgewiesene Substanzen										
Scan	RT (Min.)	µg/l (I.S. b/c/d)			Massen m/z (fett = Basispeak)		Name, Trivialname oder IUPAC	% Fit	CAS-Nr.	Bemerkungen
1967	16,10	0,4	–	1,6 d	141	61,89,106	unbekannt			
2424	18,63	0,9	–	3,4 d	180	96,124,152	unbekannt			
2446	18,75	0,6	–	2,5 d	98	43,101,116	unbekannt			
2485	18,97	0,3	–	1,3 d	95	43,137,151	unbekannt			
2720	20,27	0,4	–	1,4 d	111	95,99,141	unbekannt			
2848	20,98	0,2	–	0,9 d	95	43,109,163	unbekannt			
2863	21,07	0,3	–	1,2 d	141	73,98,126	unbekannt			
2945	21,52	0,5	–	2,1 d	137	106,151,183	unbekannt			
2998	21,81	0,6	–	2,4 d	148	105,120,149	unbekannt			
3064	22,18	0,5	–	2,0 d	153	83,98,166	unbekannt			
3329	23,65	0,2	–	1,0 d	139	43,152,153	unbekannt			
3406	24,08	0,8	–	3,1 d	144	130,169,198	unbekannt			
3418	24,14	1,0	–	4,0 d	125	43,126,195	unbekannt			
3457	24,36	0,3	–	1,1 d	207	43,208,235	unbekannt			
3497	24,58	0,2	–	0,8 d	134	91,162,190	unbekannt			
3536	24,80	0,8	–	3,2 d	125	43,93,97	unbekannt			
3558	24,92	0,2	–	0,8 d	185	114,135,200	unbekannt			
3576	25,02	0,3	–	1,1 d	82	110,179,209	unbekannt			
3612	25,22	0,6	–	2,2 d	133	109,119,207	unbekannt			
3672	25,55	0,8	–	3,4 d	137	150,153,204	unbekannt			
3706	25,74	0,6	–	2,3 d	150	121,149,195	unbekannt			
3725	25,84	0,8	–	3,0 d	137	43,164,165	unbekannt			
3796	26,24	0,3	–	1,4 d	109	43,108,136	unbekannt			
3861	26,60	1,0	–	3,9 d	137	165,208,246	unbekannt			
3935	27,01	0,8	–	3,3 d	182	136,154,183	unbekannt			
4012	27,43	1,0	–	4,0 d	189	117,132,149	unbekannt			
4074	27,78	0,2	–	0,8 d	109	137,169,244	unbekannt			
4220	28,59	0,2	–	0,8 d	217	43,165,182	unbekannt			
4236	28,68	0,5	–	2,1 d	155	43,127,162	unbekannt			
4468	29,96	0,4	–	1,7 d	148	102,135,192	unbekannt			
4481	30,03	1,0	–	3,8 d	148	135,147,192	unbekannt			
4517	30,23	0,3	–	1,0 d	187	148,175,249	unbekannt			
4605	30,72	0,6	–	2,4 d	181	152,165,210	unbekannt			
4664	31,05	0,3	–	1,1 d	144	130,145,195	unbekannt			
4764	31,60	0,2	–	1,0 d	197	43,143,194	unbekannt			
4792	31,76	0,3	–	1,3 d	193	130,144,192	unbekannt			
4838	32,01	0,5	–	1,9 d	193	43,73,129	unbekannt			
4911	32,42	0,5	–	2,1 d	179	165,178,223	unbekannt			
4953	32,65	0,5	–	1,9 d	165	137,166,193	unbekannt			
5183	33,93	0,6	–	2,5 d	43	166,180,194	unbekannt			
5254	34,32	0,4	–	1,8 d	281	136,150,236	unbekannt			

Auftraggeber
Projekt
Auftrag Nr.
Datum

HPC Harress Pickel Consult AG
U II "Kesslergrube", Grenzach-Wyhlen
A10-00306
18.10.2010

Anhang: **41**

Probenbezeichnung: KE 25						Int. Probennummer: M1002-01654						
Interne Standards												
Nr.		Name des Internen Standards (I.S.)				Konzentration (µg/l)		Wiederfindung (%)		Bemerkungen		
a		Anilin d5				1,05		16				
b		Nitrobenzol d5				1,05		73				
c		Naphthalin d8				1,05		81				
d		1-Chlorododecan				1,05		95				
e		Acenaphthen d10				2,63		-		Volumen Standard		
Nachgewiesene Substanzen												
Scan	RT (Min.)	µg/l (I.S. b/c/d)				Massen m/z (fett = Basispeak)		Name, Trivialname oder IUPAC		% Fit	CAS-Nr.	Bemerkungen
5375	34,99	0,4	–	1,6	d	147	180,223,224	unbekannt				
5415	35,21	0,3	–	1,2	d	56	135,207,253	unbekannt				
5470	35,52	0,8	–	3,1	d	193	194,239,323	unbekannt				
5515	35,77	0,7	–	2,6	d	178	160,164,206	unbekannt				
5874	37,76	0,2	–	1,0	d	181	183,257,258	unbekannt				
5975	38,32	0,3	–	1,3	d	255	113,226,256	unbekannt				
6313	40,19	0,4	–	1,6	d	254	164,255,256	unbekannt				

Aufkonzentrierungsfaktor: 500
Bestimmungsgrenze (IS Naphthalin): 0.2 µg/l

Auftraggeber
Projekt
Auftrag Nr.
Datum

HPC Harress Pickel Consult AG
U II "Kesslergrube", Grenzach-Wyhlen
A10-00306
18.10.2010

Anhang: **42**

Probenbezeichnung: KE 39					Int. Probennummer: M1002-01655				
Interne Standards									
Nr.	Name des Internen Standards (I.S.)		Konzentration (µg/l)	Wiederfindung (%)		Bemerkungen			
a	Anilin d5		1,05	31		Volumen Standard			
b	Nitrobenzol d5		1,05	88					
c	Naphthalin d8		1,05	79					
d	1-Chlorododecan		1,05	73					
e	Acenaphthen d10		2,63	-					
Nachgewiesene Substanzen									
Scan	RT (Min.)	µg/l (I.S. b/c/d)			Massen m/z (fett = Basispeak)	Name, Trivialname oder IUPAC	% Fit	CAS-Nr.	Bemerkungen
479	7,85	0,1	–	0,5 a	93	Aniline	80	62-53-3	Co-elution
1244	12,09	0,6	–	2,6 b	127	p-Chloroaniline	92	106-47-8	
1362	12,75	14,0	–	55,9 b	110	Phenol, 2-ethoxy-	90	94-71-3	
1450	13,23	0,5	–	2,1 b	121	Benzenamine, 2,5-dimethyl-	93	95-78-3	
1564	13,87	1,7	–	6,9 b	121	Benzenamine, 3,4-dimethyl-	92	95-64-7	
1809	15,22	1,4	–	5,5 b	152	2-Ethoxy-4-methylphenol	89	2563-07-7	
1832	15,35	1,8	–	7,1 b	135	Benzenamine, 2,4,6-trimethyl-	94	88-05-1	
1968	16,11	0,6	–	2,4 b	141	Benzenamine, 3-chloro-2-methyl-	89	87-60-5	
1998	16,27	1,8	–	7,0 b	141	Benzenamine, 4-chloro-2-methyl-	89	95-69-2	
2130	17,00	4,3	–	17,2 b	161	Benzenamine, 2,3-dichloro-	92	608-27-5	
2943	21,51	0,7	–	2,8 b	106	Nikethamide	86	59-26-7	
3106	22,41	3,3	–	13,2 b	169	[1,1'-Biphenyl]-2-amine	83	90-41-5	
3231	23,11	1,5	–	5,9 b	106	Benzenesulfonamide, 2-methyl-	90	88-19-7	
3282	23,39	5,8	–	23,1 b	91	Benzene, (1,1-diethylpropyl)-	85	4170-84-7	
3374	23,90	5,3	–	21,2 b	91	Benzenesulfonamide, 4-methyl-	91	70-55-3	
3673	25,56	2,7	–	10,8 b	155	Benzenesulfonamide, N,N-diethyl-4-methyl-	89	649-15-0	
3765	26,06	2,1	–	8,2 d	115,142,144	unbekannt			Hinweis auf N-Aromat
3777	26,13	9,4	–	37,7 d	77,174,216	unbekannt			
3805	26,29	0,4	–	1,8 b	136	Cyclohexylphenylacetic acid	81	3894-09-5	
3835	26,45	10,0	–	39,8 d	93,190,232	unbekannt			
4017	27,46	9,1	–	36,5 b	189	Glutethimide	93	77-21-4	
4146	28,18	3,0	–	12,2 d	77,110,202	unbekannt			
4295	29,00	8,0	–	31,9 b	215	Propyphenazone	95	479-92-5	
4475	30,00	0,4	–	1,6 d	255	Cyclic octaatomic sulfur	90	10544-50-0	
4546	30,40	0,7	–	2,8 b	129,142,169,219	unbekannt			

Auftraggeber
Projekt
Auftrag Nr.
Datum

HPC Harress Pickel Consult AG
U II "Kesslergrube", Grenzach-Wyhlen
A10-00306
18.10.2010

Anhang: **42**

Probenbezeichnung: KE 39					Int. Probennummer: M1002-01655					
Interne Standards										
Nr.	Name des Internen Standards (I.S.)				Konzentration (µg/l)		Wiederfindung (%)		Bemerkungen	
a	Anilin d5				1,05		31		Volumen Standard	
b	Nitrobenzol d5				1,05		88			
c	Naphthalin d8				1,05		79			
d	1-Chlorododecan				1,05		73			
e	Acenaphthen d10				2,63		-			
Nachgewiesene Substanzen										
Scan	RT (Min.)	µg/l (I.S. b/c/d)			Massen m/z (fett = Basispeak)		Name, Trivialname oder IUPAC	% Fit	CAS-Nr.	Bemerkungen
2803	20,73	0,5	–	2,1 d	92	121,122,164	unbekannt			
3169	22,76	0,3	–	1,4 d	171	106,173,188	unbekannt			
3459	24,37	0,9	–	3,8 d	207	164,208,235	unbekannt			
3541	24,82	0,5	–	2,0 d	93	43,85,219	unbekannt			
3558	24,92	0,4	–	1,5 d	114	43,71,115	unbekannt			
3859	26,59	0,4	–	1,4 d	124	89,106,125	unbekannt			
4245	28,73	0,5	–	1,8 d	135	91,118,136	unbekannt			
4758	31,57	0,6	–	2,2 d	106	72,142,170	unbekannt			
4876	32,22	0,9	–	3,4 d	91	119,135,162	unbekannt			
5039	33,13	0,4	–	1,4 d	255	148,212,256	unbekannt			
5975	38,32	0,7	–	2,7 d	255	113,226,256	unbekannt			
6117	39,10	0,3	–	1,3 d	310	77,281,352	unbekannt			

Aufkonzentrierungsfaktor: 600
Bestimmungsgrenze (IS Naphthalin): 0.2 µg/l

Auftraggeber
Projekt
Auftrag Nr.
Datum

HPC Harress Pickel Consult AG
U II "Kesslergrube", Grenzach-Wyhlen
A10-00306
18.10.2010

Anhang: **43**

Probenbezeichnung: KE 34				Int. Probennummer: M1002-01656					
Interne Standards									
Nr.	Name des Internen Standards (I.S.)			Konzentration (µg/l)	Wiederfindung (%)	Bemerkungen			
a	Anilin d5			1,05	16	Volumen Standard			
b	Nitrobenzol d5			1,05	91				
c	Naphthalin d8			1,05	84				
d	1-Chlorododecan			1,05	100				
e	Acenaphthen d10			2,62	-				
Nachgewiesene Substanzen									
Scan	RT (Min.)	µg/l (I.S. b/c/d)			Massen m/z (fett = Basispeak)	Name, Trivialname oder IUPAC	% Fit	CAS-Nr.	Bemerkungen
615	8,60	0,4	–	1,6 b	146	Benzene, 1,2-dichloro-	92	95-50-1	Co-elution Hinweis auf substituiertes Cyclohexen
652	8,81	0,4	–	1,6 b	146	Benzene, 1,4-dichloro-	90	106-46-7	
772	9,47	1,7	–	6,6 b	146	Benzene, 1,4-dichloro-	82	106-46-7	
1092	11,25	2,5	–	10,0 d	67,81,82	unbekannt			
1252	12,13	0,9	–	3,4 d	99	Triethyl phosphate	91	78-40-0	Co-elution
1362	12,74	4,2	–	16,7 b	110	Phenol, 2-ethoxy-	88	94-71-3	
1810	15,23	0,7	–	2,7 b	152	2-Ethoxy-4-methylphenol	87	2563-07-7	
1869	15,55	0,4	–	1,5 b	141	4-Chloro-2-methylthiophenol	84	17178-01-7	
1999	16,28	0,8	–	3,2 b	141	Benzenamine, 3-chloro-2-methyl-	89	87-60-5	
2132	17,01	0,9	–	3,7 b	161	Benzenamine, 3,5-dichloro-	90	626-43-7	
2193	17,35	1,0	–	4,1 b	144	3,5-Dimethyl-4-(2-furyl)pyridine	81	78563-72-1	
2398	18,49	1,9	–	7,5 b	135	Phenol, 4-(1,1-dimethylpropyl)-	89	80-46-6	
2485	18,97	0,8	–	3,1 d	43,95	unbekannt			
2523	19,18	1,8	–	7,1 b	161	Benzenamine, 3,5-dichloro-	90	626-43-7	
2772	20,56	0,5	–	2,1 d	91,122,138,167	unbekannt			
2804	20,74	0,7	–	2,7 d	123,137,152,180	unbekannt			
2837	20,92	0,8	–	3,0 b	205	Butylated Hydroxytoluene	83	128-37-0	
2904	21,29	0,2	–	0,7 c	143	1-Naphthalenamine	82	134-32-7	
2983	21,73	0,9	–	3,8 b	140	Methypylon	91	125-64-4	
3106	22,41	1,1	–	4,6 d	169,205,245	unbekannt			
3137	22,58	0,7	–	2,9 d	151,208	unbekannt			
3287	23,41	3,5	–	13,8 b	91	Benzene, (1,1-diethylpropyl)-	82	4170-84-7	
3373	23,89	2,2	–	8,9 b	91	Benzenesulfonamide, 4-methyl-	87	70-55-3	
3406	24,07	0,6	–	2,2 d	130,144,169,198	unbekannt			
3440	24,26	0,3	–	1,4 d	259	2,2,7,7-Tetramethyl-tetrahydro-bis[1,3]dioxolo[4,5-b;4',5'-d]pyran-3a-carboxylic acid	88	NA	
3460	24,37	0,6	–	2,2 d	164,207,235	unbekannt			
3781	26,15	11,8	–	47,1 d	77,174,216	unbekannt			
3839	26,47	9,5	–	38,1 d	93,190,232	unbekannt			
3865	26,62	0,7	–	2,6 d	173,246	unbekannt			
3947	27,07	1,3	–	5,4 d	136,154,182	unbekannt			
4015	27,45	1,7	–	6,9 b	189	Glutethimide	86	77-21-4	
4061	27,70	0,5	–	2,2 b	188	Antipyrine	88	60-80-0	
4148	28,19	3,5	–	13,8 d	77,110,202	unbekannt			
4299	29,02	15,1	–	60,4 b	215	Propyphenazone	93	479-92-5	
4374	29,44	0,6	–	2,5 b	183	3-Dibenzofuranamine	81	4106-66-5	
4409	29,63	0,7	–	3,0 b	183	3-Dibenzofuranamine	81	4106-66-5	
4476	30,01	0,8	–	3,0 d	255	Cyclic octaatomic sulfur	88	10544-50-0	
4552	30,43	1,6	–	6,3 d	142,169,223	unbekannt			

Auftraggeber
Projekt
Auftrag Nr.
Datum

HPC Harress Pickel Consult AG
U II "Kesslergrube", Grenzach-Wyhlen
A10-00306
18.10.2010

Anhang: **43**

Probenbezeichnung: KE 34				Int. Probennummer: M1002-01656				
Interne Standards								
Nr.	Name des Internen Standards (I.S.)		Konzentration (µg/l)	Wiederfindung (%)		Bemerkungen		
a	Anilin d5		1,05	16				
b	Nitrobenzol d5		1,05	91				
c	Naphthalin d8		1,05	84				
d	1-Chlorododecan		1,05	100				
e	Acenaphthen d10		2,62	-		Volumen Standard		
Nachgewiesene Substanzen								
Scan	RT (Min.)	µg/l (I.S. b/c/d)	Massen m/z (fett = Basispeak)	Name, Trivialname oder IUPAC		% Fit	CAS-Nr.	Bemerkungen
4583	30,60	2,0 – 7,9 b	230	Methanone, (2-amino-5-chlorophenyl)phenyl-		90	719-59-5	
4607	30,73	0,7 – 2,7 d	165,181,210	unbekannt				
5033	33,09	3,4 – 13,4 b	159	Benzene, 1,1'-sulfonylbis[4-chloro-		89	80-07-9	
5473	35,53	2,0 – 8,2 d	193,323	unbekannt				
5567	36,05	1,1 – 4,5 d	178	unbekannt				
5754	37,09	2,4 – 9,8 b	277	Triphenylphosphine oxide		90	791-28-6	
5976	38,32	0,7 – 2,6 d	255	unbekannt				
6279	40,00	0,6 – 2,3 d	164,193,238	unbekannt				

Auftraggeber
Projekt
Auftrag Nr.
Datum

HPC Harress Pickel Consult AG
U II "Kesslergrube", Grenzach-Wyhlen
A10-00306
18.10.2010

Anhang: **43**

Probenbezeichnung: KE 34				Int. Probennummer: M1002-01656			
Interne Standards							
Nr.	Name des Internen Standards (I.S.)	Konzentration (µg/l)	Wiederfindung (%)	Bemerkungen			
a	Anilin d5	1,05	16	Volumen Standard			
b	Nitrobenzol d5	1,05	91				
c	Naphthalin d8	1,05	84				
d	1-Chlorododecan	1,05	100				
e	Acenaphthen d10	2,62	-				
Nachgewiesene Substanzen							
Scan	RT (Min.)	µg/l (I.S. b/c/d)	Massen m/z (fett = Basispeak)	Name, Trivialname oder IUPAC	% Fit	CAS-Nr.	Bemerkungen
1607	14,10	0,3 – 1,0 d	67 82,110,140	unbekannt			
2424	18,63	0,3 – 1,0 d	180 96,124,152	unbekannt			
2448	18,76	0,2 – 0,8 d	98 43,101,116	unbekannt			
2945	21,52	0,4 – 1,5 d	106 78,111,177	unbekannt			
3000	21,82	0,2 – 0,9 d	148 71,105,120	unbekannt			
3068	22,20	0,2 – 1,0 d	153 83,98,166	unbekannt			
3543	24,83	0,5 – 2,0 d	93 43,85,219	unbekannt			
3560	24,93	0,5 – 1,8 d	114 43,135,185	unbekannt			
3642	25,38	0,4 – 1,5 d	134 99,166,223	unbekannt			
3674	25,56	0,2 – 0,9 d	155 91,137,212	unbekannt			
3727	25,85	0,4 – 1,6 d	150 89,137,195	unbekannt			
4047	27,63	0,3 – 1,0 d	113 41,69,112	unbekannt			
4176	28,34	0,2 – 1,0 d	108 43,125,196	unbekannt			
4202	28,49	0,3 – 1,1 d	217 189,216,290	unbekannt			
4248	28,74	0,2 – 0,9 d	135 91,118,162	unbekannt			
4666	31,06	0,4 – 1,7 d	144 130,145,195	unbekannt			
4705	31,27	0,4 – 1,6 d	219 253,254,255	unbekannt			
4795	31,77	0,2 – 0,9 d	144 130,145,195	unbekannt			
4838	32,01	0,4 – 1,8 d	193 165,194,239	unbekannt			
4926	32,50	0,4 – 1,7 d	206 178,204,274	unbekannt			
5186	33,94	0,3 – 1,3 d	43 71,166,194	unbekannt			
5226	34,16	0,3 – 1,1 d	190 162,164,236	unbekannt			
5273	34,42	0,4 – 1,5 d	281 136,209,236	unbekannt			
5294	34,54	0,3 – 1,2 d	193 150,194,323	unbekannt			
5428	35,28	0,4 – 1,6 d	207 135,209,253	unbekannt			
5496	35,66	0,5 – 1,9 d	177 113,149,161	unbekannt			
5828	37,50	0,2 – 0,8 d	242 241,269,270	unbekannt			
6322	40,24	0,4 – 1,6 d	164 193,238,294	unbekannt			

Aufkonzentrierungsfaktor: 530
Bestimmungsgrenze (IS Naphthalin): 0.2 µg/l

Auftraggeber
Projekt
Auftrag Nr.
Datum

HPC Harress Pickel Consult AG
U II "Kesslergrube", Grenzach-Wyhlen
A10-00306
12.05.2010

Anhang: **44**

Probenbezeichnung: P 3					Int. Probennummer: M1002-01676					
Interne Standards										
Nr.	Name des Internen Standards (I.S.)					Konzentration (µg/l)	Wiederfindung (%)	Bemerkungen		
a	Anilin d5					14	13			
b	Nitrobenzol d5					14	81			
c	Naphthalin d8					14	76			
d	1-Chlorododecan					14	64			
e	Acenaphthen d10					35	-	Volumen Standard		
Nachgewiesene Substanzen										
Scan	RT (Min.)	µg/l (I.S. b/c/d)				Massen m/z (fett = Basispeak)	Name, Trivialname oder IUPAC	% Fit	CAS-Nr.	Bemerkungen
773	9,48	6,0	–	23,9 d	83	43, 141	unbekannt			
1366	12,77	4,1	–	16,3 b	110		Phenol, 2-ethoxy-	88	94-71-3	
2774	20,57	20,1	–	80,5 d	138	122, 167	unbekannt			3-Ethoxycarbonyl-2-5-Dimethylpyrrol (Wiley9)
3106	22,41	2,9	–	11,6 d	168		á-D-Fructopyranose, 2,3:4,5-bis-O-(1-methylethylidene)-	83	20880-92-6	
3641	25,38	7,0	–	27,8 d	134	138,177,223	unbekannt			
3933	27,00	4,2	–	16,7 d	182	136,154	unbekannt			
4288	28,96	36,8	–	147,1 d	73		n-Hexadecanoic acid	80	57-10-3	Co-elution
4477	30,01	16,5	–	66,1 d	255		Cyclic octaatomic sulfur	89	10544-50-0	
4848	32,07	51,0	–	203,9 d	73		Octadecanoic acid	89	57-11-4	
5468	35,50	4,5	–	18,0 d	193	323,396	unbekannt			

Aufkonzentrierungsfaktor:

90

Bestimmungsgrenze (IS Naphthalin):

1 µg/l

Auftraggeber
Projekt
Auftrag Nr.
Datum

HPC Harress Pickel Consult AG
U II "Kesslergrube", Grenzach-Wyhlen
A10-00306
15.04.2010

Anhang: **45**

Probenbezeichnung: P 11					Int. Probennummer:		M1002-01677	
Interne Standards								
Nr.	Name des Internen Standards (I.S.)		Konzentration (µg/l)	Wiederfindung (%)		Bemerkungen		
a	Anilin d5		1,05	29				
b	Nitrobenzol d5		1,05	108				
c	Naphthalin d8		1,05	115				
d	1-Chlorododecan		1,05	78				
e	Acenaphthen d10		2,63	-		Volumen Standard		
Nachgewiesene Substanzen								
Scan	RT (Min.)	µg/l (I.S. b/c/d)	Massen m/z (fett = Basispeak)	Name, Trivialname oder IUPAC	% Fit	CAS-Nr.	Bemerkungen	
538	8,18	1,54 – 6,1 a	93	Aniline	92	62-53-3		
1415	13,04	1,14 – 4,6 b	110	Phenol, 2-ethoxy-	89	94-71-3		
2816	20,80	0,28 – 1,1 d	192	Sulfur	91	13798-23-7		
3086	22,30	1,68 – 6,7 d	45,113,171,259	unbekannt				
3163	22,73	0,44 – 1,8 b	205	unbekannt			Zuckerähnliche Struktur	
3177	22,81	0,30 – 1,2 d	101	D-Mannitol, 1,2:3,4:5,6-tris-O-(1-methylethylidene)-	81	3969-59-3		
3224	23,07	25,97 – 103,9 d	143	D-Mannitol, 1,2:3,4:5,6-tris-O-(1-methylethylidene)-	92	3969-59-3	Zuckerähnliche Struktur	
3261	23,27	0,49 – 1,9 d	101	D-Mannitol, 1,2:3,4:5,6-tris-O-(1-methylethylidene)-	83	3969-59-3	Zuckerähnliche Struktur	
3353	23,78	2,13 – 8,5 d	101	D-Mannitol, 1,2:3,4:5,6-tris-O-(1-methylethylidene)-	88	3969-59-3	Zuckerähnliche Struktur	
3578	25,03	0,58 – 2,3 d	73,131	unbekannt			ein Siloxan	
3608	25,19	0,52 – 2,1 d	73,131	unbekannt				
3685	25,62	15,18 – 60,7 d	259	2,2,5,5-Tetramethyldihydro-1,3,4,6,8-pentaoxacyclopenta[a]indene-3a-carboxylic acid	91	NA		
3764	26,06	0,36 – 1,5 d	43,59,171,343	unbekannt			Zuckerähnliche Struktur	
3806	26,29	2,97 – 11,9 d	43,109,285	unbekannt			Substituiertes Furanol oder Oxepin	
3875	26,67	1,38 – 5,5 d	43,59,171,343	unbekannt			Zuckerähnliche Struktur	
3921	26,93	0,28 – 1,1 d	43,101,143,201,343	unbekannt			Eine substituierte Furanose	
3974	27,22	0,41 – 1,7 d	43,101,143,201,343	unbekannt			Zuckerähnliche Struktur	
4545	30,39	4,61 – 18,4 d	256	Cyclic octaatomic sulfur	92	10544-50-0	S8	
4708	31,29	0,30 – 1,2 d	4397,113,171,187	unbekannt			Zuckerähnliche Struktur	
5556	35,99	0,42 – 1,7 b	177	Phenol, 2,2'-methylenebis[6-(1,1-dimethylethyl)-4-methyl-	84	119-47-1		
6135	39,20	3,13 – 12,5 d	57,102,185,242	unbekannt			Zuckerähnliche Struktur	
6250	39,84	3,41 – 13,6 d	113,185,243,359	unbekannt			Zuckerähnliche Struktur	
6293	40,08	3,40 – 13,6 d	113,185,243,359	unbekannt			Zuckerähnliche Struktur	

Aufkonzentrierungsfaktor:

590

Bestimmungsgrenze (IS Naphthalin):

0.1 µg/l

Auftraggeber
Projekt
Auftrag Nr.
Datum

HPC Harress Pickel Consult AG
U II "Kesslergrube", Grenzach-Wyhlen
A10-00306
12.05.2010

Anhang: **46**

Probenbezeichnung: KE 37				Int. Probennummer: M1002-01678			
Interne Standards							
Nr.	Name des Internen Standards (I.S.)	Konzentration (µg/l)	Wiederfindung (%)		Bemerkungen		
a	Anilin d5	1,05	38		Volumen Standard		
b	Nitrobenzol d5	1,05	123				
c	Naphthalin d8	1,05	130				
d	1-Chlorododecan	1,05	102				
e	Acenaphthen d10	2,64	-				
Nachgewiesene Substanzen							
Scan	RT (Min.)	µg/l (I.S. b/c/d)	Massen m/z (fett = Basispeak)	Name, Trivialname oder IUPAC	% Fit	CAS-Nr.	Bemerkungen
476	7,83	2,4 – 9,7 a	93	Aniline	94	62-53-3	S6
772	9,48	2,0 – 7,9 d	83,141	unbekannt			
2481	18,95	1,6 – 6,5 d	43,95,137,182	unbekannt			
2753	20,46	2,7 – 10,7 d	192	Sulfur	95	13798-23-7	
3105	22,41	1,1 – 4,4 d	169,205,261	unbekannt			
3162	22,72	1,7 – 6,7 d	245	(2,2,5,5-Tetramethyldihydro-1,3,4,6,8-pentaoxacyclopenta[a]inden-3a-yl)methanol	89	NA	Hinweis auf Zuckerähnliche Verbindung Hinweis auf Schwefel S7
3436	24,24	1,3 – 5,3 d	259	2,2,7,7-Tetramethyl-tetrahydro-bis[1,3]dioxolo[4,5-b;4',5'-d]pyran-3a-carboxylic acid	89	NA	
3503	24,61	5,4 – 21,7 b	108	Phenacetin	94	62-44-2	
3532	24,77	1,6 – 6,3 d	59,171,303	unbekannt			
3719	25,81	1,1 – 4,4 d	64,160,224	unbekannt			
3939	27,03	1,0 – 4,0 b	194	Caffeine	90	58-08-2	Hinweis auf 1,1'-Biisoquinoline
4298	29,02	8,2 – 32,8 b	215	Propyphenazone	93	479-92-5	
4501	30,15	54,1 – 216,5 d	61,128,160,256	Cyclic octaatomic sulfur	90	10544-50-0	
5973	38,30	0,8 – 3,0 d	255,256	unbekannt			
6714	42,41	1,3 – 5,0 d	197,273,300,317	unbekannt			

Aufkonzentrierungsfaktor: 1100
Bestimmungsgrenze (IS Naphthalin): 0.5 µg/l

Auftraggeber
Projekt
Auftrag Nr.
Datum

HPC Harress Pickel Consult AG
U II "Kesslergrube", Grenzach-Wyhlen
A10-00306
18.10.2010

Anhang: **47**

Probenbezeichnung: **KE 43** Int. Probennummer: **M1002-01679**

Interne Standards				
Nr.	Name des Internen Standards (I.S.)	Konzentration (µg/l)	Wiederfindung (%)	Bemerkungen
a	Anilin d5	63	32	
b	Nitrobenzol d5	63	77	
c	Naphthalin d8	63	71	
d	1-Chlorododecan	63	47	
e	Acenaphthen d10	157	-	

Nachgewiesene Substanzen							
Scan	RT (Min.)	µg/l (I.S. b/c/d)			Massen m/z (fett = Hauptfragment)	Name, Trivialname oder IUPAC	% Fit CAS-Nr. Bemerkungen
2773	20,57	85	-	341 d	122,138,167	unbekannt	84 1678-25-7 3-Ethoxycarbonyl-2,5-Dimethylpyrrol (Wiley9)
3933	27,00	48	-	191 d	136,154,182	unbekannt	
4476	30,01	166	-	664 b	92	Benzenesulfonanilide	
4547	30,40	26	-	106 d	247	unbekannt	
4613	30,77	88	-	354 d	140,214,303	unbekannt	
5193	33,98	55	-	221 b	295,296	unbekannt	82 5466-77-3 2-Propenoic acid, 3-(4-methoxyphenyl)-, 2-ethylhexyl ester
5249	34,29	76	-	304 b	178		
5468	35,51	27	-	108 d	57,123,193	unbekannt	Hinweis auf 1,1'-
5973	38,30	28	-	112 d	255	unbekannt	
6078	38,89	30	-	121 d	204,232,249,360	unbekannt	

Auftraggeber
Projekt
Auftrag Nr.
Datum

HPC Harress Pickel Consult AG
U II "Kesslergrube", Grenzach-Wyhlen
A10-00306
18.10.2010

Anhang: **47**

Probenbezeichnung: KE 43					Int. Probennummer: M1002-01679						
Interne Standards											
Nr.	Name des Internen Standards (I.S.)				Konzentration (µg/l)		Wiederfindung (%)		Bemerkungen		
a	Anilin d5				63		32				
b	Nitrobenzol d5				63		77				
c	Naphthalin d8				63		71				
d	1-Chlorododecan				63		47				
e	Acenaphthen d10				157		-				
Nachgewiesene Substanzen											
Scan	RT (Min.)	µg/l (I.S. b/c/d)				Massen m/z (fett = Hauptfragment)		Name, Trivialname oder IUPAC	% Fit	CAS-Nr.	Bemerkungen
3641	25,38	22	–	88	d	134	138,166,223	unbekannt			
3681	25,60	19	–	75	d	150	121,149,195	unbekannt			
4044	27,61	16	–	65	d	69	55,83,97	unbekannt			
4445	29,83	17	–	68	d	214	97,140,168	unbekannt			
4698	31,24	20	–	79	d	97	55,57,69	unbekannt			
5102	33,48	19	–	76	d	97	57,69,71	unbekannt			
5341	34,80	16	–	65	d	97	57,69,71	unbekannt			
6993	43,96	17	–	69	d	191	95,207,281	unbekannt			

Aufkonzentrierungsfaktor: 18
Bestimmungsgrenze (IS Naphthalin): 5 µg/l

Auftraggeber
Projekt
Auftrag Nr.
Datum

HPC Harress Pickel Consult AG
U II "Kesslergrube", Grenzach-Wyhlen
A10-00306
18.10.2010

Anhang: **48**

Probenbezeichnung: KE 28					Int. Probennummer:			M1002-01680
Interne Standards								
Nr.	Name des Internen Standards (I.S.)		Konzentration (µg/l)	Wiederfindung (%)		Bemerkungen		
a	Anilin d5		69	19				
b	Nitrobenzol d5		69	48				
c	Naphthalin d8		69	38				
d	1-Chlorododecan		69	30				
e	Acenaphthen d10		172	-				
Nachgewiesene Substanzen								
Scan	RT (Min.)	µg/l (I.S. b/c/d)	Massen m/z (fett = Basispeak)	Name, Trivialname oder IUPAC		% Fit	CAS-Nr.	Bemerkungen
335	7,05	47 – 188 d	43	Butanoic acid, 3-oxo-, ethyl ester		89	141-97-9	Hinweis auf Cyclohexan oder Cyclohexen Verbindung
472	7,81	380 – 1519 a	93	Aniline		95	62-53-3	
1091	11,24	163 – 652 d	81	unbekannt				
1565	13,87	112 – 448 b	121	Benzenamine, 3,4-dimethyl-		94	95-64-7	3-Ethoxycarbonyl-2,5-Dimethylpyrrol (Wiley9)
1576	13,94	44 – 176 b	121	Benzenamine, 3,4-dimethyl-		81	95-64-7	
1938	15,94	41 – 165 b	135	Benzenamine, 2,4,6-trimethyl-		87	88-05-1	
2192	17,35	403 – 1613 d	106,134,179	unbekannt				
2396	18,48	104 – 415 d	109	Ethyl 4-methyl-5-imidazolecarboxylate		82	51605-32-4	
2783	20,62	1541 – 6165 d	122,138,167	unbekannt				
3054	22,12	293 – 1171 d	110,138,183	unbekannt				
3107	22,42	123 – 492 d	169,205,245	unbekannt				
3141	22,61	57 – 227 d	134	Pyrrole-3-carboxylic acid, 4-formyl-5-methyl-, ethyl ester		83	332414-41-2	
3641	25,38	262 – 1048 d	134,138,177,223	unbekannt				
3862	26,60	228 – 912 d	173,201,217,246	unbekannt				Hinweis auf Aromatische Verbindung
3954	27,11	1524 – 6095 d	136,154,182	unbekannt				
3972	27,21	235 – 941 d	135,181,210	unbekannt				
4103	27,94	108 – 433 d	138,165,210	unbekannt				
4326	29,17	4383 – 17533 d	166,193,239	unbekannt				
4477	30,01	367 – 1467 d	255	Cyclic octaatomic sulfur		92	10544-50-0	
4562	30,48	137 – 547 d	160,173,201,232	unbekannt				
4634	30,88	368 – 1471 d	140,193,214	unbekannt				
4832	31,98	147 – 589 d	193,259	unbekannt				
4935	32,55	1145 – 4581 d	178,206,249	unbekannt				
5241	34,25	1975 – 7899 d	162,190,236	unbekannt				
5424	35,26	194 – 778 d	135,207,253	unbekannt				
5471	35,52	309 – 1236 d	193	unbekannt				
5496	35,66	97 – 388 b	177	Phenol, 2,2'-methylenebis[6-(1,1-dimethylethyl)-4-methyl-		83	119-47-1	
5687	36,72	168 – 672 d	164,204,278	unbekannt				
6209	39,61	8 – 32 c	278	unbekannt				
6274	39,97	237 – 946 d	164,238,294,340	unbekannt				
6321	40,23	227 – 907 d	164,238,294,340	unbekannt				

Auftraggeber
Projekt
Auftrag Nr.
Datum

HPC Harress Pickel Consult AG
U II "Kesslergrube", Grenzach-Wyhlen
A10-00306
18.10.2010

Anhang: **48**

Probenbezeichnung: **KE 28** Int. Probennummer: **M1002-01680**

Interne Standards				
Nr.	Name des Internen Standards (I.S.)	Konzentration (µg/l)	Wiederfindung (%)	Bemerkungen
a	Anilin d5	69	19	
b	Nitrobenzol d5	69	48	
c	Naphthalin d8	69	38	
d	1-Chlorododecan	69	30	
e	Acenaphthen d10	172	-	

Nachgewiesene Substanzen											
Scan	RT (Min.)	µg/l (I.S. b/c/d)				Massen m/z (fett = Basispeak)		Name, Trivialname oder IUPAC	% Fit	CAS-Nr.	Bemerkungen
1906	15,76	61	–	242	d	84	57,83,171	unbekannt			
2483	18,96	62	–	246	d	182	109,137,153	unbekannt			
2671	20,00	34	–	137	d	196	108,109,125	unbekannt			
2878	21,15	48	–	192	d	170	43,124,142	unbekannt			
2973	21,68	49	–	196	d	110	111,138,140	unbekannt			
3219	23,04	39	–	158	d	135	85,107,137	unbekannt			
3281	23,38	90	–	362	d	139	96,109,164	unbekannt			
3386	23,96	29	–	116	d	155	43,99,128	unbekannt			
3399	24,04	33	–	131	d	166	137,138,180	unbekannt			
3457	24,36	54	–	215	d	137	108,136,182	unbekannt			
3474	24,45	40	–	158	d	120	121,148,165	unbekannt			
3531	24,77	58	–	230	d	59	43,71,303	unbekannt			
3547	24,86	23	–	91	d	172	156,174,201	unbekannt			
3605	25,18	48	–	191	d	109	150,151,196	unbekannt			
3704	25,73	26	–	105	d	150	178,195,206	unbekannt			
3879	26,70	19	–	74	d	161	133,150,189	unbekannt			
4200	28,48	70	–	279	d	217	189,216,290	unbekannt			
4248	28,74	99	–	395	d	179	151,152,180	unbekannt			
4365	29,39	24	–	97	d	136	135,165,182	unbekannt			
4387	29,51	73	–	292	d	194	167,168,195	unbekannt			
4419	29,69	58	–	230	d	135	166,225,254	unbekannt			
4450	29,86	53	–	214	d	168	140,160,214	unbekannt			
4521	30,26	49	–	196	d	201	172,200,246	unbekannt			
4610	30,75	91	–	363	d	59	71,97,140	unbekannt			
4723	31,38	34	–	135	d	285	43,140,186	unbekannt			
4879	32,24	61	–	245	d	204	176,189,203	unbekannt			
4980	32,80	62	–	248	d	165	137,166,193	unbekannt			
5032	33,09	29	–	117	d	165	137,166,193	unbekannt			
5139	33,68	92	–	368	d	166	137,165,193	unbekannt			
5362	34,92	76	–	303	d	342	223,295,384	unbekannt			
5513	35,75	22	–	87	d	239	225,240,286	unbekannt			
5658	36,56	57	–	229	d	178	164,222,278	unbekannt			
6041	38,68	73	–	291	d	285	239,311,312	unbekannt			
6375	40,53	59	–	237	d	213	212,278,332	unbekannt			

Aufkonzentrierungsfaktor:

15

Bestimmungsgrenze (IS Naphthalin):

10 µg/l

Auftraggeber
Projekt
Auftrag Nr.
Datum

HPC Harress Pickel Consult AG
U II "Kesslergrube", Grenzach-Wyhlen
A10-00306
18.10.2010

Anhang: **49**

Probenbezeichnung: P 12				Int. Probennummer: M1002-01681			
Interne Standards							
Nr.	Name des Internen Standards (I.S.)		Konzentration (µg/l)	Wiederfindung (%)		Bemerkungen	
a	Anilin d5		80	24			
b	Nitrobenzol d5		80	75			
c	Naphthalin d8		80	52			
d	1-Chlorododecan		80	41			
e	Acenaphthen d10		201	-		Volumen Standard	
Nachgewiesene Substanzen							
Scan	RT (Min.)	µg/l (I.S. b/c/d)	Massen m/z (fett = Hauptfragment)	Name, Trivialname oder IUPAC	% Fit	CAS-Nr.	Bemerkungen
476	7,83	23 – 92 a	93	Aniline	82	62-53-3	Hinweis auf alkyliertes Cyclohexen
1097	11,28	1675 – 6701 d	81	unbekannt			
1172	11,69	47 – 187 d	81	unbekannt			
2194	17,36	96 – 383 d	106,134,179	unbekannt	86	19037-72-0	
2390	18,44	325 – 1298 d	82,109,152	unbekannt			
2434	18,69	35 – 138 d	81	Cyclopentene, 4,4-dimethyl-			
2482	18,95	108 – 431 d	109,137,153,182	unbekannt			
2776	20,58	454 – 1815 d	122,138,167	unbekannt	83	2436-79-5	
3099	22,37	88 – 352 d	134,205	unbekannt			
3295	23,46	59 – 235 d	71,95,99	unbekannt			
3641	25,38	82 – 329 d	134,138,166,223	unbekannt			
3718	25,81	110 – 441 d	150,199	unbekannt	90	10544-50-0	
3878	26,69	68 – 273 d	133,161,189	unbekannt			
3938	27,02	271 – 1083 d	136,154,182	unbekannt			
3977	27,24	76 – 303 d	119,203,221	unbekannt			
4052	27,66	28 – 113 d	164	1H-Pyrrole-2,4-dicarboxylic acid, 3,5-dimethyl-, diethyl ester	83	2436-79-5	
4307	29,07	1265 – 5059 d	166,193,239	unbekannt	84	57-11-4	
4476	30,01	178 – 714 d	255	Cyclic octaatomic sulfur			
4557	30,46	112 – 449 d	160,173,201,232	unbekannt			
4841	32,03	69 – 275 d	73	Octadecanoic acid			
4926	32,50	158 – 633 d	178,206,249	unbekannt			
5210	34,08	385 – 1540 d	162,190,236	unbekannt			
5230	34,19	80 – 320 d	178,206,251,297	unbekannt			
5413	35,20	75 – 300 d	135,207,253	unbekannt			
5452	35,42	72 – 287 d	245,274	unbekannt			
5724	36,92	18 – 70 b	155,181,253	unbekannt			

Auftraggeber
Projekt
Auftrag Nr.
Datum

HPC Harress Pickel Consult AG
U II "Kesslergrube", Grenzach-Wyhlen
A10-00306
18.10.2010

Anhang: **49**

Probenbezeichnung: P 12				Int. Probennummer: M1002-01681						
Interne Standards										
Nr.		Name des Internen Standards (I.S.)			Konzentration (µg/l)		Wiederfindung (%)		Bemerkungen	
a		Anilin d5			80		24			
b		Nitrobenzol d5			80		75			
c		Naphthalin d8			80		52			
d		1-Chlorododecan			80		41			
e		Acenaphthen d10			201		-		Volumen Standard	
Nachgewiesene Substanzen										
Scan	RT (Min.)	µg/l (I.S. b/c/d)			Massen m/z (fett = Hauptfragment)		Name, Trivialname oder IUPAC	% Fit	CAS-Nr.	Bemerkungen
1995	16,25	25	–	101 d	95	43,55,67	unbekannt			
2415	18,58	34	–	137 d	81	79,96,109	unbekannt			
3043	22,06	35	–	140 d	110	111,138,183	unbekannt			
3367	23,86	37	–	147 d	99	43,71,95	unbekannt			
3457	24,36	41	–	164 d	137	108,136,182	unbekannt			
3733	25,89	38	–	153 d	199	43,72,95	unbekannt			
3756	26,02	22	–	86 d	170	96,124,142	unbekannt			
3789	26,20	32	–	128 d	199	43,81,95	unbekannt			
3861	26,60	32	–	126 d	246	173,201,217	unbekannt			
4084	27,83	20	–	81 d	165	138,164,210	unbekannt			
4236	28,68	32	–	128 d	179	151,152,180	unbekannt			
4355	29,34	48	–	192 d	136	108,135,182	unbekannt			
4950	32,63	42	–	169 d	165	137,166,193	unbekannt			
5364	34,93	19	–	78 d	273	166,272,319	unbekannt			
5468	35,50	50	–	199 d	193	166,194,323	unbekannt			

Aufkonzentrierungsfaktor: 10
Bestimmungsgrenze (IS Naphthalin): 10 µg/l

Auftraggeber
Projekt
Auftrag Nr.
Datum

HPC Harress Pickel Consult AG
U II "Kesslergrube", Grenzach-Wyhlen
A10-00306
18.10.2010

Anhang: **50**

Probenbezeichnung: KE 42					Int. Probennummer:		M1002-01930	
Interne Standards								
Nr.	Name des Internen		Konzentration	Wiederfindung (%)		Bemerkungen		
a	Anilin d5		1,67	30				
b	Nitrobenzol d5		1,67	69				
c	Naphthalin d8		1,67	59				
d	1-Chlorododecan		1,67	83				
e	Acenaphthen d10		4,17	-				
Nachgewiesene Substanzen								
Scan	RT (Min.)	µg/l (I.S. b/c/d)	Massen m/z (fett = Hauptfragment)	Name, Trivialname oder IUPAC		% Fit	CAS-Nr.	Bemerkungen
803	9,65	9,88 – 39,5 d	83 43,56,141	unbekannt				
883	10,09	0,56 – 2,2 d	81 69,79,96	unbekannt				Terpenoid, viele Mögl., verm. biogen
1134	11,48	35,09 – 140,4 d	81 67,79,82	unbekannt				Terpen, viele Mögl., verm. biogen
1294	12,37	1,46 – 5,8 d	125 67,97,140	unbekannt				Terpen, viele Mögl., verm. biogen
1639	14,28	14,37 – 57,5 d	67 82,110,140	unbekannt				Terpen, viele Mögl., verm. biogen
1680	14,51	1,83 – 7,3 d	67 41,82,110	Pentalene, octahydro-, cis-		84	1755-05-1	
1977	16,15	0,76 – 3,0 d	81 67,96,139	unbekannt				Cycl. terpenähnl. Verb.
2016	16,37	0,63 – 2,5 d	82 43,125,167	unbekannt				
2048	16,55	1,63 – 6,5 d	140 43,68,123	unbekannt				
2222	17,51	1,44 – 5,7 d	134 105,126,179	unbekannt				
2418	18,60	8,07 – 32,3 d	152 43,82,109	unbekannt				
2443	18,74	0,63 – 2,5 d	81 41,79,96	unbekannt				Mögl., auch Isomer
2467	18,87	0,93 – 3,7 d	81 67,79,96	unbekannt				Mögl., auch Isomer
2481	18,95	1,37 – 5,5 d	108 107,124,153	unbekannt				N-Methyl-2-Pyridon-4-Carboxylsäure CAS 33972-97-2 (Wiley9) oder Isomer passt gut, MW 153
2514	19,13	3,48 – 13,9 d	95 43,99,137	unbekannt				
2557	19,37	0,63 – 2,5 d	81 43,96,111	unbekannt				Cyclohexenteilstr., terpenähnl.
2814	20,79	26,12 – 104,5 d	138 120,122,167	unbekannt				N-haltig, evtl. Pyrrolteilstr.
2948	21,53	0,59 – 2,3 d	168 124,139,152	unbekannt				
3053	22,12	3,56 – 14,2 d	169 69,95,125	unbekannt				Terpenoid, viele Mögl., verm. biogen
3137	22,58	0,55 – 2,2 d	205 43,134,245	unbekannt				
3166	22,74	1,10 – 4,4 d	188 85,136,169	unbekannt				
3249	23,20	1,53 – 6,1 d	135 85,100,107	unbekannt				
3307	23,52	0,86 – 3,4 d	167 124,168,169	Aprobarbital		82	77-02-1	
3321	23,60	1,38 – 5,5 d	135 85,105,107	unbekannt				Terpenoidähnlich
3481	24,49	30,87 – 123,5 d	259 43,59,95	2,2,7,7-Tetramethyl-tetrahydro-bis[1,3]dioxolo[4,5-b;4',5'-d]pyran-3a-carboxylic acid		92	NA	zuckerähnl., evtl. biogen
3508	24,64	1,34 – 5,4 d	69 43,141,167	unbekannt				Terpenoid, viele Mögl., verm. biogen
3672	25,55	2,67 – 10,7 d	134 138,166,223	unbekannt				
3792	26,21	6,04 – 24,1 d	150 134,197,206	unbekannt				
3864	26,61	0,97 – 3,9 d	150 149,170,195	unbekannt				
3898	26,80	15,27 – 61,1 d	246 173,201,217	unbekannt				
3976	27,23	3,74 – 15,0 d	182 136,154,183	unbekannt				
4008	27,41	8,28 – 33,1 d	135 137,181,210	unbekannt				
4043	27,60	1,52 – 6,1 d	149 187,215,260	unbekannt				
4127	28,07	4,20 – 16,8 d	137 109,183,198	unbekannt				
4234	28,66	1,95 – 7,8 d	217 134,216,290	unbekannt				
4330	29,19	5,38 – 21,5 d	215 60,73,230	unbekannt				
4552	30,42	1,62 – 6,5 d	201 172,200,246	unbekannt				
4705	31,27	0,57 – 2,3 d	251 177,193,324	unbekannt				
4867	32,17	3,92 – 15,7 d	193 165,194,239	unbekannt				
4884	32,26	4,39 – 17,6 d	73 43,60,129	Octadecanoic acid		86	57-11-4	

Auftraggeber
Projekt
Auftrag Nr.
Datum

HPC Harress Pickel Consult AG
U II "Kesslergrube", Grenzach-Wyhlen
A10-00306
18.10.2010

Anhang: **50**

Probenbezeichnung: KE 42				Int. Probennummer: M1002-01930						
Interne Standards										
Nr.	Name des Internen		Konzentration	Wiederfindung (%)		Bemerkungen				
a	Anilin d5		1,67	30						
b	Nitrobenzol d5		1,67	69						
c	Naphthalin d8		1,67	59						
d	1-Chlorododecan		1,67	83						
e	Acenaphthen d10		4,17	-						
Nachgewiesene Substanzen										
Scan	RT (Min.)	µg/l (I.S. b/c/d)			Massen m/z (fett = Hauptfragment)		Name, Trivialname oder IUPAC	% Fit	CAS-Nr.	Bemerkungen
5116	33,55	1,12	–	4,5	d	165	166,299,301	unbekannt		Evtl. Bis-Isoquinolin sein CAS 17999-93-8
5297	34,55	2,14	–	8,6	d	165	137,166,193	unbekannt		
5327	34,72	2,79	–	11,1	d	193	165,194,323	unbekannt		
5366	34,94	1,68	–	6,7	d	149	165,166,223	unbekannt		
5393	35,08	1,82	–	7,3	d	166	137,165,193	unbekannt		
5513	35,75	24,12	–	96,5	d	193	194,239,323	unbekannt		
5892	37,85	0,57	–	2,3	d	252	196,224,253	unbekannt		
6012	38,52	0,55	–	2,2	d	255	226,256,257	unbekannt		
6151	39,29	0,56	–	2,2	d	213	214,257,332	unbekannt		
6408	40,71	0,72	–	2,9	d	213	212,240,332	unbekannt		

Aufkonzentrierungsfaktor: 599
Bestimmungsgrenze: 1 µg/l



Labors: Analytik, Ökotoxikologie,
Verfahrenstechnik

ANALYSEN-BERICHT

HPC Harress Pickel Consult AG
Martin Steckermeier
Nansenstrasse 5
79539 Lörrach

Schlieren, 12. Mai 2010

Projekt: DU II "Kesslergrube", Grenzach-Wyhlen
BMG Auftragsnummer: A10-00611
Datum Auftrag: 30. März 2010
Datum Analysen: 30. März - 12. Mai 2010

Probenliste & Untersuchungsauftrag

Anzahl Proben 1

Parameter	Anz.	Bestimmungsmethode	BMG SAA-Nr
Screening organische Substanzen	1	GC-MS	BMG-0170

Bemerkungen Die mit einem * markierten Prüfungen sind nicht im Geltungsbereich der Akkreditierung nach ISO/IEC 17025.
Ohne gegenteilige schriftliche Mitteilung werden Feststoffproben sechs Monate und Wasserproben drei Monate nach Probeneingang entsorgt.
Die angegebenen Messwerte beziehen sich ausschliesslich auf die bezeichneten Proben. Angaben zu den Prüfspezifikationen (Bestimmungsgrenze, Messunsicherheit) können auf Anfrage abgegeben werden. Der Bericht darf nicht auszugsweise ohne schriftliche Zustimmung des Labors vervielfältigt werden.

Resultate siehe nächste Seite(n).

dipl. Chem. ETH Marina Kuster
Leiterin Analytik

BMG ENGINEERING AG

Labors:
Ifangstrasse 11
CH-8952 Schlieren/Zürich

Tel. 044 732 92 92 • Fax 044 732 92 21
labors@bmgeng.ch
www.bmgeng.ch

Seite 1 von 2



S SCHWEIZERISCHER PRÜFSTELLENDIENST
T SERVICE D'ESSAI
S SERVIZIO DIE PROVA IN SVIZZERA
SWISS TESTING SERVICE STS-No. 166



Labors: Analytik, Ökotoxikologie,
Verfahrenstechnik

Auftraggeber	HPC Harress Pickel Consult AG
Projekt	DU II "Kesslergrube", Grenzach-Wyhlen
Auftrag Nr.	A10-00611
Datum Bericht	12.05.2010

Probenbezeichnung	P6					
Tiefe						
Datum Probenahme	30.03.2010					
Interne Probenbezeichnung	M1003-02669					
Datum Probeneingang	30.03.2010					
Probenart	Grundwasser					
Organische Summenparameter						
Screening organische Substanzen	siehe Anhang 1					

Screening von Organischen Substanzen im Wasser:

Probenaufbereitung und Messbedingungen

Extraktionsmittel	Dichlormethan																		
Extraktion	Die Probe wird nach Zugabe von internen Standards zweimal extrahiert. Zuerst bei pH=2, danach bei pH=9. Die zwei Extrakte werden zusammengegeben und aufkonzentriert.																		
Anreicherungsfaktor	ca. 1000																		
GC-MS Bedingungen	<table border="0"> <tr> <td>Gaschromatograph:</td> <td>Finnigan: Trace Ultra</td> </tr> <tr> <td>Säule:</td> <td>DB5ms, 30m x 0.25 mm, 0.25 µm</td> </tr> <tr> <td>Injektion:</td> <td>2 µl; Splitless</td> </tr> <tr> <td>Temperaturprogramm:</td> <td>40°C, 2 Min.; 6°C/Min bis 280°C; 10°C bis 300°C; 6 Min.</td> </tr> <tr> <td>Massenselektiver Detektor:</td> <td>Single Quadrupole</td> </tr> <tr> <td>Ionisierung:</td> <td>EI; 70 eV</td> </tr> <tr> <td>Massen:</td> <td>33 - 500 m/z</td> </tr> <tr> <td>Scangeschwindigkeit</td> <td>3 Scans/Sek.</td> </tr> <tr> <td>Bibliothek:</td> <td>NIST 08</td> </tr> </table>	Gaschromatograph:	Finnigan: Trace Ultra	Säule:	DB5ms, 30m x 0.25 mm, 0.25 µm	Injektion:	2 µl; Splitless	Temperaturprogramm:	40°C, 2 Min.; 6°C/Min bis 280°C; 10°C bis 300°C; 6 Min.	Massenselektiver Detektor:	Single Quadrupole	Ionisierung:	EI; 70 eV	Massen:	33 - 500 m/z	Scangeschwindigkeit	3 Scans/Sek.	Bibliothek:	NIST 08
Gaschromatograph:	Finnigan: Trace Ultra																		
Säule:	DB5ms, 30m x 0.25 mm, 0.25 µm																		
Injektion:	2 µl; Splitless																		
Temperaturprogramm:	40°C, 2 Min.; 6°C/Min bis 280°C; 10°C bis 300°C; 6 Min.																		
Massenselektiver Detektor:	Single Quadrupole																		
Ionisierung:	EI; 70 eV																		
Massen:	33 - 500 m/z																		
Scangeschwindigkeit	3 Scans/Sek.																		
Bibliothek:	NIST 08																		

Generelle Bemerkungen zu den Screenings

% Fit: Übereinstimmung mit Bibliotheksspektren; Es werden nur Substanzen mit Namen angegeben wenn die Übereinstimmung mit den Bibliotheksspektren > 80% ist. Substanzen mit geringerer Übereinstimmung werden als "unbekannt" bezeichnet und zusätzlich zum Hauptfragment werden weitere Massenfragmente angegeben.

Diese Screenings sind semiquantitativ; die Gehaltsangabe erfolgt als Bereichsangabe (= 50 % - 200% des berechneten Wertes).

Die Berechnung der Gehalte erfolgt über einen Flächenvergleich mit 1-Chlordodecan. Falls die Substanz eine aromatische oder polyaromatische Struktur aufweist wird die Berechnung mit Nitrobenzol d5 bzw. Naphthalin d8 angegeben.

* Identifizierung wurde mit Deconvolution software AMDIS (von NIST, USA) bestätigt

Auftraggeber
Projekt
Auftrag Nr.
Datum

HPC Harress Pickel Consult AG
U II "Kesslergrube", Grenzach-Wyhlen
A10-00611
29.04.2010

Anhang: **1**

Probenbezeichnung: P 6				Int. Probennummer:		M1003-02669		
Interne Standards								
Nr.	Name des Internen Standards (I.S.)		Konzentration (µg/l)	Wiederfindung (%)		Bemerkungen		
a	Anilin d5		1,11	24				
b	Nitrobenzol d5		1,11	76				
c	Naphthalin d8		1,11	74				
d	1-Chlorododecan		1,11	65				
e	Acenaphthen d10		2,78	-		Volumen Standard		
Nachgewiesene Substanzen								
Scan	RT (Min.)	µg/l (I.S. b/c/d)		Massen m/z (fett = Basispeak)	Name, Trivialname oder IUPAC	% Fit	CAS-Nr.	Bemerkungen
2073	16,69	0,26	– 1,0 b	104	Phthalic anhydride	91	85-44-9	
4476	30,01	1,27	– 5,1 d	160	Cyclic octaatomic sulfur	88	10544-50-0	

Aufkonzentrierungsfaktor: 900
Bestimmungsgrenze (IS Naphthalin): 0.05 µg/l