

Labors: Analytik, Ökotoxikologie,
Verfahrenstechnik

ANALYSEN-BERICHT

HPC Harress Pickel Consult AG
Martin Steckermeier
Nansenstrasse 5
79539 Lörrach

Schlieren, 14. Oktober 2010

Projekt: DU II "Kesslergrube", Grenzach-Wyhlen
BMG Auftragsnummer: A10-01106
Datum Auftrag: 15. Juni 2010
Datum Analysen: 15. Juni - 4. August 2010

Probenliste & Untersuchungsauftrag

Anzahl Proben 6

Parameter	Anz.	Bestimmungsmethode	BMG SAA-Nr
Screening organische Substanzen	6	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/ZürichTel. 044 732 92 92 • Fax 044 732 92 21
labors@bmgeg.ch
www.bmgeg.ch

Seite 1 von 3

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
A10-01106
14.10.2010

Probenbezeichnung	P 6	P 8	CI 37	P 7		
Tiefe						
Datum Probenahme	15.06.2010	15.06.2010	15.06.2010	15.06.2010		
Interne Probenbezeichnung	M1006-04788	M1006-04789	M1006-04790	M1006-04791		
Datum Probeneingang	15.06.2010	15.06.2010	15.06.2010	15.06.2010		
Probenart	Wasser	Wasser	Wasser	Wasser		
Organische Summenparameter						
Screening organische Substanzen	siehe Anhang 1	siehe Anhang 2	siehe Anhang 3	siehe Anhang 4		

Probenbezeichnung	CI 36	Blind 13				
Tiefe						
Datum Probenahme	15.06.2010	15.06.2010				
Interne Probenbezeichnung	M1006-04792	M1006-04793				
Datum Probeneingang	15.06.2010	15.06.2010				
Probenart	Wasser	Wasser				
Organische Summenparameter						
Screening organische Substanzen	siehe Anhang 5	siehe Anhang 6				

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	<p>Gaschromatograph: Finnigan: Trace Ultra</p> <p>Säule: DB5ms, 30m x 0.25 mm, 0.25 µm</p> <p>Injektion: 2 µl; Splitless</p> <p>Temperaturprogramm: 40°C, 2 Min.; 6°C/Min bis 280°C; 10°C bis 300°C; 6 Min.</p> <p>Massenselektiver Detektor: Single Quadrupole</p> <p>Ionisierung: EI; 70 eV</p> <p>Massen: 33 - 500 m/z</p> <p>Scangeschwindigkeit: 3 Scans/Sek.</p> <p>Bibliothek: NIST 08</p>



Labors: Analytik, Ökotoxikologie,
Verfahrenstechnik

Generelle Bemerkungen zu den Screenings

Alle Identifikationen sind tentativ, solange diese nicht mit Referenzverbindungen bestätigt worden sind.

% 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 Harres Pickel Consult G
DU II "Kesslergrube", Grenzach-Wyhlen
A10-01106
04.08.2010

Anhang: **1**

Probenbezeichnung: P 6				Int. Probennummer: M1006-04788-01						
Interne Standards										
Nr.	Name des Internen			Konzentration	Wiederfindung (%)		Bemerkungen			
a	Anilin d5			1,2	29					
b	Nitrobenzol d5			1,2	62					
c	Naphthalin d8			1,2	70					
d	1-Chlorododecan			1,2	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
549	8,24	0,3	–	1,1 b	146	77,79,107	Benzene, 1,4-dichloro-	92	106-46-7	Hinweis auf alkyliertes Anilin (z.B. p-Toluidin)
585	8,44	1,3	–	5,1 b	146		Benzene, 1,3-dichloro-	95	541-73-1	
701	9,08	3,5	–	14,0 b	146		Benzene, 1,3-dichloro-	96	541-73-1	
924	10,32	0,1	–	0,5 d	106		unbekannt			
2419	18,60	0,1	–	0,4 b	162	147,281,367	Phenol, 3,4-dichloro-	89	95-77-2	Hinweis auf halogeniertes Anilin
2738	20,37	0,2	–	0,7 d	73		unbekannt			
2875	21,13	0,1	–	0,4 b	111		Benzene, 1-chloro-4-(methylsulfonyl)-	84	98-57-7	
3677	25,57	0,7	–	2,8 b	141	Benzenesulfonamide, N-butyl-	91	3622-84-2		
3820	26,37	0,1	–	0,3 d	210	68,167,195	unbekannt			
4049	27,64	0,1	–	0,3 d	90	63,126,205	unbekannt			
4397	29,56	0,1	–	0,3 d	64		Cyclic octaatomic sulfur	93	10544-50-0	
4957	32,67	0,2	–	0,9 b	159		Benzene, 1,1'-sulfonylbis[4-chloro-	88	80-07-9	

Aufkonzentrierungsfaktor: 943
Bestimmungsgrenze in µg/l (Naphthalin d8): 0,05

Auftraggeber
Projekt
Auftrag Nr.
Datum

HPC Harres Pickel Consult G
DU II "Kesslergrube", Grenzach-Wyhlen
A10-01106
23.09.2010

Anhang: **2**

Probenbezeichnung: P 8				Int. Probennummer:			M1006-04789-01	
Interne Standards								
Nr.	Name des Internen		Konzentration	Wiederfindung (%)		Bemerkungen		
a	Anilin d5		1,2	36				
b	Nitrobenzol d5		1,2	71				
c	Naphthalin d8		1,2	78				
d	1-Chlorododecan		1,2	84				
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
3677	25,57	0,6	– 2,5 b	141	Benzenesulfonamide, N-butyl-	92	3622-84-2	
3981	27,26	0,1	– 0,4 b	173	Benzenesulfonamide, 4-chloro-3-nitro-		97-09-6	oder Isomer

Aufkonzentrierungsfaktor: 1041
Bestimmungsgrenze in µg/l (Naphthalin d8): 0,05

Rot und Kursiv: Kommentare von Prof. Dr. M. Oehme (Institut für Angewandte Analytische Chemie, Niederteufen, Schweiz)

Auftraggeber
Projekt
Auftrag Nr.
Datum

HPC Harres Pickel Consult G
DU II "Kesslergrube", Grenzach-Wyhlen
A10-01106
23.09.2010

Anhang: **3**

Probenbezeichnung: CI 37					Int. Probennummer: M1006-04790-01						
Interne Standards											
Nr.	Name des Internen				Konzentration		Wiederfindung (%)		Bemerkungen		
a	Anilin d5				1,2		34				
b	Nitrobenzol d5				1,2		62				
c	Naphthalin d8				1,2		68				
d	1-Chlorododecan				1,2		75				
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
922	10,31	0,2	–	0,8	b	106		Aniline, N-methyl-	88	100-61-8	oder anderes Alkan
2775	20,57	0,3	–	1,1	b	205		Butylated Hydroxytoluene	88	128-37-0	
3676	25,57	0,5	–	2,2	b	141		Benzenesulfonamide, N-butyl-	91	3622-84-2	
5132	33,64	0,08	–	0,3	d	57		Eicosane, 10-methyl-	86	54833-23-7	
5561	36,02	0,09	–	0,4	d	171		Hexanoic acid, 2-ethyl-, 1,2-ethanediylbis(oxy-2,1-ethanediyl) ester		94-28-0	
5576	36,10	0,12	–	0,5	d	239	79.81.99	unbekannt			

Aufkonzentrierungsfaktor: 1035

Bestimmungsgrenze in µg/l (Naphthalin d8): 0,05

Rot und Kursiv: Kommentare von Prof. Dr. M. Oehme (Institut für Angewandte Analytische Chemie, Niederteufen, Schweiz)

Auftraggeber
Projekt
Auftrag Nr.
Datum

HPC Harres Pickel Consult G
DU II "Kesslergrube", Grenzach-Wyhlen
A10-01106
23.09.2010

Anhang: **4**

Probenbezeichnung: P7				Int. Probennummer: M1006-04791-01			
Interne Standards							
Nr.	Name des Internen		Konzentration	Wiederfindung (%)		Bemerkungen	
a	Anilin d5		1,2	25			
b	Nitrobenzol d5		1,2	73			
c	Naphthalin d8		1,2	76			
d	1-Chlorododecan		1,2	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
1963	16,07	0,2 – 0,9 b	159	Benzene, 1,2,4-trichloro-3-methyl-	91	2077-46-5	oder Isomer
2071	16,67	0,12 – 0,5 b	161	Benzenamine, 2,3-dichloro-	90	608-27-5	oder Isomer
2435	18,69	0,01 – 0,03 d	173	85,173,175 unbekannt			Hinweis auf ein Trichlordimethylbenzol
2876	21,13	0,03 – 0,11 d	111	75,175,190 Benzene, 1-chloro-4-(methylsulfonyl)-	82		
2970	21,66	0,02 – 0,07 d	195	Benzeneamine, 2,4,5-trichloro	74	634-91-3	
3445	24,29	0,09 – 0,4 b	284	Benzene, hexachloro-	89	118-74-1	
3676	25,57	0,7 – 2,9 b	105	Benzenesulfonamide, N-butyl-	91	3622-84-2	
4049	27,64	0,05 – 0,2 d	90	126,205,207 unbekannt			
4219	28,58	0,3 – 1,1 d	73	n-Hexadecanoic acid	87	57-10-3	
5377	35,00	0,2 – 0,6 d	129	Diisooctyl adipate	90	1330-86-5	Wird als Weichmacher eingesetzt

Aufkonzentrierungsfaktor: 1068
Bestimmungsgrenze in µg/l (Naphthalin d8): 0,005

Die Bestimmungsgrenze wurde anhand der von Prof. Dr. M. Oehme zusätzlich identifizierten Substanzen angepasst.

Rot und Kursiv: Kommentare von Prof. Dr. M. Oehme (Institut für Angewandte Analytische Chemie, Niederteufen, Schweiz)

Auftraggeber
Projekt
Auftrag Nr.
Datum

HPC Harres Pickel Consult G
DU II "Kesslergrube", Grenzach-Wyhlen
A10-01106
27.09.2010

Anhang: **5**

Probenbezeichnung: CI 36				Int. Probennummer:		M1006-04792-01		
Interne Standards								
Nr.	Name des Internen	Konzentration	Wiederfindung (%)		Bemerkungen			
a	Anilin d5	1,2	34					
b	Nitrobenzol d5	1,2	64					
c	Naphthalin d8	1,2	70					
d	1-Chlorododecan	1,2	81					
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
2072	16,68	0,1 – 0,3 b	0	43,109,151 81,137,180	Benzenamine, 2,4-dichloro-	78	554-00-7	oder Isomer
2425	18,64	0,1 – 0,2 d	95		unbekannt			
2742	20,39	0,0 – 0,1 d	123		unbekannt			
2874	21,12	0,2 – 0,7 b	111		Benzene, 1-chloro-4-(methylsulfonyl)-	82	98-57-7	
2904	21,29	0,1 – 0,6 b	140	81,137,208	Methyprylon	81	125-64-4	
3073	22,23	0,1 – 0,3 d	151		unbekannt			
3107	22,42	0,1 – 0,5 d	43		D-Mannitol, 1,2:3,4:5,6-tris-O-(1-methylethylidene)-	77	3969-59-3	
3213	23,00	0,1 – 0,3 b	91	43,124,126 94,122,134	Benzene, (1,1-diethylpropyl)-	83	4170-84-7	
3354	23,78	0,0 – 0,2 d	125		unbekannt			
3514	24,67	0,1 – 0,5 d	123		unbekannt			
3539	24,81	0,2 – 0,9 d	123		unbekannt			
3602	25,16	0,1 – 0,3 d	150	122,137,195	unbekannt			
3676	25,57	1,2 – 4,8 b	141	43,92,232 63,126,205	Benzenesulfonamide, N-butyl-	89	3622-84-2	
3755	26,01	0,2 – 0,8 d	93		unbekannt			
4049	27,64	0,1 – 0,6 d	90		unbekannt			
4071	27,76	0,3 – 1,1 d	202		unbekannt			
4221	28,59	0,6 – 2,3 b	215	97,155,184 97,155,184	Propylphenazone	82	NA	
4306	29,06	0,2 – 0,7 d	183		unbekannt			
4340	29,25	0,1 – 0,5 d	183		unbekannt			
4475	30,00	0,1 – 0,5 b	169		2-[2-Quinolylmethyleneamino]ethanol	71	5971-05-1	
4875	32,21	0,1 – 0,4 d	193	57,71,137	unbekannt			
4957	32,67	0,1 – 0,3 b	159	75,111,160	Benzene, 1, 1'-sulfonylbis[4-chloro-	79	80-07-9	
5399	35,12	0,1 – 0,3 d	193	194,239,323	unbekannt			
5666	36,60	0,2 – 0,7 b	277		Triphenylphosphine oxide	88	791-28-6	

Aufkonzentrierungsfaktor: 1029

Bestimmungsgrenze in µg/l (Naphthalin d8): 0,025

Die Bestimmungsgrenze wurde anhand der von Prof. Dr. M. Oehme zusätzlich identifizierten Substanzen angepasst.

Rot und Kursiv: Kommentare von Prof. Dr. M. Oehme (Institut für Angewandte Analytische Chemie, Niederteufen, Schweiz)

Auftraggeber
Projekt
Auftrag Nr.
Datum

HPC Harres Pickel Consult G
DU II "Kesslergrube", Grenzach-Wyhlen
A10-01106
04.08.2010

Anhang: **6**

Probenbezeichnung: Blind 13				Int. Probennummer: M1006-04793-01			
Interne Standards							
Nr.	Name des Internen		Konzentration	Wiederfindung (%)		Bemerkungen	
a	Anilin d5		1,2	35			
b	Nitrobenzol d5		1,2	71			
c	Naphthalin d8		1,2	75			
d	1-Chlorododecan		1,2	91			
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
							keine Substanzen nachweisbar

Aufkonzentrierungsfaktor: 807
Bestimmungsgrenze in µg/l (Naphthalin d8): 0,05



Labors: Analytik, Ökotoxikologie,
Verfahrenstechnik

ANALYSEN-BERICHT

HPC Harress Pickel Consult AG
Martin Steckermeier
Nansenstrasse 5
79539 Lörrach

Schlieren, 14. Oktober 2010

Projekt: DU II "Kesslergrube", Grenzach-Wyhlen
BMG Auftragsnummer: A10-01194
Datum Auftrag: 25. Juni 2010
Datum Analysen: 28. Juni - 26. August 2010

Probenliste & Untersuchungsauftrag

Anzahl Proben 7

Parameter	Anz.	Bestimmungsmethode	BMG SAA-Nr
Screening organische Substanzen	7	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.bmgeng.ch

Seite 1 von 3



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
A10-01194
14.10.2010

Probenbezeichnung	KE 34	Blind 25.6	P 2	P 10a		
Tiefe						
Datum Probenahme	25.06.2010	25.06.2010	27.06.2010	27.06.2010		
Interne Probenbezeichnung	M1006-05223	M1006-05224	M1006-05225	M1006-05226		
Datum Probeneingang	25.06.2010	25.06.2010	28.06.2010	28.06.2010		
Probenart	Wasser	Wasser	Wasser	Wasser		
Organische Summenparameter						
Screening organische Substanzen	siehe Anhang 1	siehe Anhang 2	siehe Anhang 3	siehe Anhang 4		

Probenbezeichnung	KE 21	KE 35	Blind 27.6.			
Tiefe						
Datum Probenahme	27.06.2010	27.06.2010	27.06.2010			
Interne Probenbezeichnung	M1006-05227	M1006-05228	M1006-05229			
Datum Probeneingang	28.06.2010	28.06.2010	28.06.2010			
Probenart	Wasser	Wasser	Wasser			
Organische Summenparameter						
Screening organische Substanzen	siehe Anhang 5	siehe Anhang 6	siehe Anhang 7			

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	<div> Gaschromatograph: Säule: Injektion: Temperaturprogramm: Massenselektiver Detektor: Ionisierung: Massen: Scangeschwindigkeit Bibliothek: </div> <div> Finnigan: Trace Ultra DB5ms, 30m x 0.25 mm, 0.25 µm 2 µl; Splitless 40°C, 2 Min.; 6°C/Min bis 280°C; 10°C bis 300°C; 6 Min. Single Quadrupole EI; 70 eV 33 - 500 m/z 3 Scans/Sek. NIST 08 </div>

Generelle Bemerkungen zu den Screenings

Alle Identifikationen sind tentativ, solange diese nicht mit Referenzverbindungen bestätigt worden sind.

% 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

Harress Pickel Consult AG
DU II Kesslergrube, Grenzach Wyhlen
A10-01194
24.09.2010

Anhang: **1**

Probenbezeichnung: KE 34										Int. Probennummer:		M1006-05223	
Interne Standards													
Nr.		Name des Internen				Konzentration		Wiederfindung (%)		Bemerkungen			
a		Anilin d5				1,1		18					
b		Nitrobenzol d5				1,1		66					
c		Naphthalin d8				1,1		77					
d		1-Chlorododecan				1,1		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	
210	6,36	0,5	–	2,0	b	91		Benzene, 1-chloro-2-methyl-	92	95-49-8	oder Isomer		
518	8,07	0,2	–	1,0	b	146		Benzene, 1,4-dichloro-	91	106-46-7	oder Isomer		
556	8,28	0,3	–	1,0	b	146		Benzene, 1,3-dichloro-	92	541-73-1	oder Isomer		
680	8,97	0,8	–	3,4	b	146		Benzene, 1,2-dichloro-			oder Isomer + Interferenz		
709	9,13	0,1	–	0,3	d	83	43,56,141	unbekannt					
906	10,22	0,4	–	1,5	d	71	43,45,73	unbekannt					
1000	10,74	1,7	–	7,0	d	81	67,79,82	unbekannt			Hinweis auf alkylsubstituiertes Cyclohexen oder Isomer		
1168	11,67	1,4	–	5,5	d	99		Triethyl phosphate	93	78-40-0	Ein Weichmacher		
1272	12,25	3,2	–	12,6	b	110		Phenol, 2-ethoxy-	91	94-71-3			
1518	13,61	0,2	–	0,7	d	67	82,97,140	unbekannt					
1669	14,45	0,1	–	0,4	d	69	68,97,140	unbekannt					
1690	14,56	0,1	–	0,3	d	69	68,97,140	unbekannt					
1711	14,68	0,2	–	1,0	b	117		2-Phenylbutyronitrile	89	69350-73-8	oder Isomer		
1722	14,74	0,2	–	1,0	b	124		2-Ethoxy-4-methylphenol	89	2563-07-7	oder Isomer		
1742	14,85	1,0	–	4,0	b	135		Benzenamine, 2,4,6-trimethyl-	92	88-05-1	oder Isomer		
1776	15,04	0,2	–	0,9	b	158		4-Chloro-2-methylthiophenol	86	17178-01-7	oder Isomer		
1875	15,59	0,4	–	1,8	d	141		Benzenamine, 5-chloro-2-methyl-	83	95-79-4	oder Isomer plus Interferenz		
1906	15,76	0,7	–	2,9	b	141		Benzenamine, 3-chloro-2-methyl-	82	87-60-5	oder Isomer		
2006	16,32	0,2	–	0,6	d	139	43,109,134	unbekannt					
2038	16,49	0,9	–	3,7	b	161		Benzenamine, 3,4-dichloro-	83	95-76-1	oder Isomer		
2063	16,63	0,4	–	1,6	d	109	43,124,152	unbekannt					
2102	16,85	0,5	–	2,1	d	144	116,117,173	unbekannt					
2226	17,53	0,1	–	0,5	d	101	43,116,172	unbekannt					
2268	17,77	0,3	–	1,1	d	165	43,77,180	unbekannt					
2308	17,99	1,7	–	6,8	b	135		Phenol, 4-(1,1-dimethylpropyl)-	81	80-46-6	oder Isomer		
2335	18,14	1,1	–	4,3	d	124	96,123,180	unbekannt					
2358	18,27	0,9	–	3,6	d	98	43,101,116	unbekannt			Hinweis auf Terpenoid		
2394	18,47	0,8	–	3,3	d	95	43,99,134	unbekannt					
2416	18,59	0,4	–	1,5	d	82	109,137,152	unbekannt			Hinweis auf substituiertes Cyclohexanon		
2428	18,65	1,4	–	5,6	d	161	99.135,163	unbekannt			Hinweis auf dichlorsubstituiertes Benzol		
2584	19,52	0,6	–	2,2	d	91	43,57,69	unbekannt					
2626	19,75	0,6	–	2,6	d	141	95,99,123	unbekannt					
2664	19,96	0,4	–	1,5	d	43	69,71,111	unbekannt					
2694	20,13	1,4	–	5,7	d	118	59,119,174	unbekannt			Hinweis auf Benzoessäurebenzylester		
2711	20,22	2,9	–	11,4	d	123	137,152,180	unbekannt			Terpenoid ähnlich		
2750	20,44	0,5	–	2,1	d	95	43,163,205	unbekannt					
2774	20,57	0,4	–	1,6	d	141	55,98,126	unbekannt					
2806	20,75	0,9	–	3,6	c	143		1-Naphthalenamine	90	134-32-7			
2854	21,02	0,6	–	2,2	d	137	69.97.183	unbekannt					
2868	21,09	0,3	–	1,1	d	97	69,113,123	unbekannt					
2887	21,20	1,2	–	5,0	d	140	83,98,139	unbekannt			Methylprylone ähnlich		
2901	21,28	0,6	–	2,4	d	105	91,120,148	unbekannt			Eventuell Benzoylverbindung		
2936	21,47	0,1	–	0,5	d	151	43,123,135	unbekannt					
2976	21,69	0,8	–	3,2	d	98	43,55,83	unbekannt					

Auftraggeber
Projekt
Auftrag Nr.
Datum

Harress Pickel Consult AG
DU II Kesslergrube, Grenzach Wyhlen
A10-01194
24.09.2010

Anhang: **1**

Probenbezeichnung: KE 34					Int. Probennummer:			M1006-05223	
Interne Standards									
Nr.	Name des Internen		Konzentration		Wiederfindung (%)		Bemerkungen		
a	Anilin d5		1,1		18				
b	Nitrobenzol d5		1,1		66				
c	Naphthalin d8		1,1		77				
d	1-Chlorododecan		1,1		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
3011	21,89	1,4	– 5,5	d	169	43,116,168	unbekannt		
3042	22,06	4,7	– 18,9	b	151			120-25-2	
3071	22,22	2,4	– 9,7	d	245	(2,2,5,5-Tetramethyl-tetrahydro-1,3,4,6,8-pentaoxa-cyclopenta[a]inden-8a-yl)-methanol	87	NA	
3116	22,47	0,1	– 0,4	d	169	43,168,181	unbekannt		
3138	22,59	1,4	– 5,5	b	90		80	88-19-7	
3187	22,86	2,3	– 9,4	d	91	105,147,167	unbekannt		Hinweis auf alkylsubstituiertes Benzol
3235	23,13	0,6	– 2,2	d	139	43,125,153	unbekannt		
3278	23,37	3,1	– 12,3	b	91		85	70-55-3	
3310	23,54	0,7	– 2,7	d	144	103,130,169	unbekannt		
3323	23,62	1,1	– 4,3	d	125	43,124,126	unbekannt		
3344	23,73	0,4	– 1,6	d	43		85	NA	
						2,2,7,7-Tetramethyl-tetrahydro-bis[1,3]dioxolo[4,5-b;4',5'-d]pyran-3a-carboxylic acid			
3365	23,85	0,4	– 1,8	d	207	43,208,235	unbekannt		
3385	23,96	0,3	– 1,0	d	99	43,98,137	unbekannt		
3443	24,28	1,1	– 4,2	d	125	43,93,97	unbekannt		
3463	24,39	0,5	– 2,0	d	139	43,69,185	unbekannt		
3482	24,50	0,4	– 1,8	d	82	110,137,154	unbekannt		
3513	24,67	0,3	– 1,2	d	123	43,119,133	unbekannt		
3525	24,74	0,3	– 1,3	d	167	43,59,93	unbekannt		
3574	25,01	1,1	– 4,2	d	137	43,91,204	unbekannt		
3634	25,34	4,2	– 16,7	d	89	43,61,69	unbekannt		*
3660	25,48	1,6	– 6,4	d	150	151,178,207	unbekannt		Teilstruktur 178 u ähnlich Tetrahydronaphthalen (z.B. CAS 54549-75-9) + 45 u (-COOH an Aromat (M-17, M-45) + Rest
3681	25,60	10,8	– 43,3	d	174	77,173,216	unbekannt		Acetyl an vermutlich Tetrahydronaphthalin + Alkylgruppen
3713	25,78	0,6	– 2,5	d	150	136,149,195	unbekannt		
3738	25,92	12,4	– 49,6	b	232		92		Wiley9
						1-phenyl-3-methyl-4-hydroxy-(prop-2-yl)-2,5-dihydropyrazole-5-one			
3765	26,07	0,8	– 3,2	d	137	43,165,208	unbekannt		
3808	26,30	0,4	– 1,5	d	94	43,106,123	unbekannt		
3823	26,39	0,7	– 2,9	d	123	95,124,246	unbekannt		
3855	26,56	1,2	– 4,8	d	136	154,182,183	unbekannt		
3891	26,76	0,2	– 0,6	d	43	69,91,135	unbekannt		
3915	26,90	1,8	– 7,0	b	189				oder Homolog
3942	27,05	0,3	– 1,2	d	181	179,196,225	unbekannt		
3959	27,14	1,0	– 4,0	d	180	96,106,188	unbekannt		
4018	27,47	0,2	– 0,9	d	178	43,67,179	unbekannt		

Auftraggeber
Projekt
Auftrag Nr.
Datum

Harress Pickel Consult AG
DU II Kesslergrube, Grenzach Wyhlen
A10-01194
24.09.2010

Anhang: 1

Probenbezeichnung: KE 34				Int. Probennummer:				M1006-05223			
Interne Standards											
Nr.		Name des Internen		Konzentration		Wiederfindung (%)		Bemerkungen			
a		Anilin d5		1,1		18					
b		Nitrobenzol d5		1,1		66					
c		Naphthalin d8		1,1		77					
d		1-Chlorododecan		1,1		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	
4047	27,63	3,4	– 13,6 d	202	56,77,110	unbekannt				Sehr wenig Information im MS. besteht aus Phenyl + Teilstr. 110 u + Rest 15 u. Aromatisch. Geradz. Anz. N. A	
4078	27,80	0,3	– 1,3 d	179	81,137,207	unbekannt					
4108	27,97	0,1	– 0,5 d	217	43,216,290	unbekannt					
4138	28,13	0,5	– 2,1 d	155	43,56,97	unbekannt					
4198	28,47	12,9	– 51,6 b	215		Propyphenazone		92	479-92-5		
4222	28,60	0,2	– 0,6 d	123	43,77,89	unbekannt					
4277	28,90	2,8	– 11,0 d	183	97,155,184	unbekannt					
4311	29,09	2,1	– 8,3 d	183	97,155,184	unbekannt					
4360	29,36	0,3	– 1,1 d	64	128,133,256	unbekannt					
4421	29,70	2,3	– 9,3 d	148	135,187,192	unbekannt					
4455	29,89	2,0	– 8,1 d	169	115,129,142	unbekannt					
4480	30,03	2,7	– 10,7 b	230		Benz[c]isoxazole, 1,3-dihydro-5-chloro-3-phenyl-		91	NA	Nicht eindeutig, evtl. 2-amino-5-chlorophenyl) phenyl-methanone	
4501	30,15	1,0	– 3,9 d	181	152,165,210	unbekannt					
4566	30,51	0,6	– 2,4 d	144	130,195,221	unbekannt					
4602	30,70	2,6	– 10,5 b	219		2-methyl-4-phenyl-6-chloro-benzo[3]1,3-diazine		95		oder Isomer, Wiley9	
4665	31,05	0,1	– 0,5 d	43	91,143,197	unbekannt					
4696	31,23	1,3	– 5,0 b	144		Indole, 1,7-dimethyl-				oder Isomer	
4774	31,66	0,2	– 0,7 d	91	105,119,135	unbekannt					
4806	31,84	0,5	– 1,9 d	179	165,178,223	unbekannt					
4822	31,92	0,2	– 0,7 d	204	43,232,274	unbekannt					
4844	32,05	0,1	– 0,3 d	180	43,55,69	unbekannt					
4925	32,50	4,9	– 19,7 b	159		Benzene, 1,1'-sulfonylbis[4-chloro-		92	80-07-9	*	
4981	32,81	0,1	– 0,3 d	112	43,55,93	unbekannt					
5018	33,01	0,2	– 1,0 d	43	71,167,169	unbekannt					
5047	33,17	0,3	– 1,2 d	234	152,165,195	unbekannt					
5065	33,27	0,1	– 0,4 d	181	43,144,145	unbekannt					
5082	33,37	0,5	– 1,9 d	43	71,180,194	unbekannt					
5150	33,74	0,2	– 0,9 d	183	43,69,91	unbekannt					
5191	33,97	0,2	– 0,6 d	193	43,69,95	unbekannt					
5210	34,07	0,1	– 0,6 d	233	133,205,232	unbekannt					
5234	34,21	0,1	– 0,6 d	43	55,71,183	unbekannt					
5261	34,36	0,2	– 0,9 d	135	43,69,150	unbekannt					
5371	34,97	0,9	– 3,8 d	193	194,239,323	unbekannt					
5463	35,48	0,5	– 1,8 d	135	91,136,178	unbekannt					
5503	35,70	0,4	– 1,7 d	178	43,95,123	unbekannt					
5520	35,79	0,2	– 1,0 d	123	43,95,178	unbekannt					
5651	36,52	5,9	– 23,6 b	277		Triphenylphosphine oxide		92	791-28-6		
5727	36,94	0,3	– 1,2 d	242	241,243,269	unbekannt					
5809	37,40	0,3	– 1,3 d	181	43,57,286	unbekannt					
5865	37,71	0,1	– 0,6 d	255	113,226,256	unbekannt					
6090	38,95	0,2	– 0,6 d	113	43,101,243	unbekannt					

Auftraggeber
Projekt
Auftrag Nr.
Datum

Harress Pickel Consult AG
DU II Kesslergrube, Grenzach Wyhlen
A10-01194
24.09.2010

Anhang: **1**

Probenbezeichnung: KE 34					Int. Probennummer:			M1006-05223		
Interne Standards										
Nr.	Name des Internen		Konzentration		Wiederfindung (%)		Bemerkungen			
a	Anilin d5		1,1		18					
b	Nitrobenzol d5		1,1		66					
c	Naphthalin d8		1,1		77					
d	1-Chlorododecan		1,1		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
6133	39,19	0,1	–	0,6	d	113	43,101,243	unbekannt		
6452	40,96	0,4	–	1,5	d	57	43,71,240	unbekannt		
6707	42,37	0,9	–	3,7	d	317	182,197,300	unbekannt		
6722	42,46	0,3	–	1,1	d	317	182,197,300	unbekannt		
6739	42,55	0,6	–	2,5	d	317	182,197,300	unbekannt		
6765	42,69	0,5	–	1,8	d	317	182,197,300	unbekannt		
6784	42,80	0,8	–	3,2	d	317	98,182,197	unbekannt		

Aufkonzentrierungsfaktor: 1281

Bestimmungsgrenze in µg/l (Naphthalin d8): 0,14

Die Bestimmungsgrenze wurde anhand der von Prof. Dr. M. Oehme zusätzlich identifizierten Substanzen angepasst.

Rot und Kursiv: Kommentare von Prof. Dr. M. Oehme (Institut für Angewandte Analytische Chemie, Niederteufen, Schweiz)

Auftraggeber
Projekt
Auftrag Nr.
Datum

Harress Pickel Consult AG
DU II Kesslergrube, Grenzach Wyhlen
A10-01194
26.08.2010

Anhang: **2**

Probenbezeichnung: Blind 25.06.					Int. Probennummer:		M1006-05224		
Interne Standards									
Nr.	Name des Internen		Konzentration	Wiederfindung (%)		Bemerkungen			
a	Anilin d5		1,1	27					
b	Nitrobenzol d5		1,1	74					
c	Naphthalin d8		1,1	82					
d	1-Chlorododecan		1,1	93					
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
3932	26,99	0,1	– 0,4 d	57	71,73,141	unbekannt			

Aufkonzentrierungsfaktor: 1512

Bestimmungsgrenze in µg/l (Naphthalin d8): 0,05

Auftraggeber
Projekt
Auftrag Nr.
Datum

Harress Pickel Consult AG
DU II Kesslergrube, Grenzach Wyhlen
A10-01194
21.09.2010

Anhang: **3**

Probenbezeichnung: P 2					Int. Probennummer:		M1006-05225			
Interne Standards										
Nr.	Name des Internen		Konzentration		Wiederfindung (%)		Bemerkungen			
a	Anilin d5		1,1		22					
b	Nitrobenzol d5		1,1		69					
c	Naphthalin d8		1,1		74					
d	1-Chlorododecan		1,1		96					
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
682	8,98	0,4	–	1,5 d	83	43,56,141	unbekannt			
1001	10,74	1,1	–	4,4 d	81	54,67,82	unbekannt			Hinweis auf alkylsubstituiertes Cyclohexen oder Isomer
1274	12,26	1,1	–	4,3 b	110		Phenol, 2-ethoxy-	91	94-71-3	
1724	15,75	0,2	–	0,7 b	124		Phenol, 2-ethoxy-4-methyl	71	2563-07-7	oder Isomer
1877	15,60	0,2	–	0,9 b	141		Benzenamine, 3-chloro-2-methyl-	87	87-60-5	oder Isomer
1908	15,77	0,3	–	1,2 b	141		Benzenamine, 4-chloro-2-methyl-	86	95-69-2	oder Isomer
2040	16,50	0,1	–	0,5 b	161		Benzenamine, 2,5-dicloro-	87	95-82-9	
2105	16,86	0,1	–	0,6 d	144	106,134,179	unbekannt			
2306	17,98	2,0	–	8,1 b	135		Phenol, 4-(1,1-dimethylpropyl)-	92	80-46-6	
2396	18,48	0,3	–	1,3 d	95	43,109,151	unbekannt			
2682	20,06	0,3	–	1,4 d	91	122,138,167	unbekannt			
2746	20,42	0,1	–	0,5 d	191	57,205,206	unbekannt			
2805	20,74	0,6	–	2,3 c	143		1-Naphthalenamine	91	134-32-7	
2843	20,95	0,6	–	2,3 b	111		Benzene, 1-chloro-4-(methylsulfonyl)-	85	98-57-7	
2954	21,57	0,2	–	0,8 d	110	111,138,183	unbekannt			
3011	21,89	0,4	–	1,8 d	169	43,116,168	unbekannt			Hinweis auf ein Diphenylamin plus Interferenz m/z 116, 205,245, etc.
3075	22,24	10,7	–	43,0 d	43		(2,2,5,5-Tetramethyl-tetrahydro-1,3,4,6,8-pentaoxa-cyclopenta[a]inden-8a-yl)-methanol	93	NA	
3184	22,84	1,5	–	5,8 b	91		Benzene, (1,1-diethylpropyl)-	87	4170-84-7	oder Isomer
3210	22,99	0,2	–	0,8 d	43		D-Mannitol, 1,2:3,4:5,6-tris-O-(1-methylethylidene)-	86	3969-59-3	* Hilfsstoff Formulierung
3266	23,30	0,5	–	2,1 b	91		Benzenesulfonamide, 4-methyl-	88	70-55-3	
3311	23,55	0,2	–	0,6 d	144	103,130,169	unbekannt			Teilstruktur ist ein Dimethylindol
3342	23,72	0,2	–	0,7 d	43		2,2,7,7-Tetramethyl-tetrahydro-bis[1,3]dioxolo[4,5-b;4',5'-d]pyran-3a-carboxylic acid	91	NA	oder Isomer
3435	24,24	0,2	–	0,7 d	131	43,59,73	unbekannt			
3462	24,39	0,1	–	0,5 d	131	43,73,101	unbekannt			
3523	24,72	1,0	–	4,0 d	43		2,2,5,5-Tetramethyldihydro-1,3,4,6,8-pentaoxacyclopenta[a]indene-3a-carboxylic acid	90	NA	
3545	24,85	0,1	–	0,5 d	134	43,138,223	unbekannt			
3615	25,23	0,2	–	1,0 d	150	43,59,195	unbekannt			
3652	25,44	1,1	–	4,5 d	43	109,150,195	unbekannt			Hinweis auf zuckerähnliche Verbindung
3676	25,57	0,3	–	1,3 d	174	77,105,216	unbekannt			Acetyl an vermutlich Tetrahydronaphthalin + Alkylgruppen
3726	25,85	0,7	–	2,7 d	93	43,77,190,232	1-phenyl-3-methyl-4-hydroxy-(prop-2-yl)-2,5-dihydropyrazole-5-one,	92		Wiley9
3727	25,85	0,7	–	2,8 d	93	43,92,232	unbekannt			
3765	26,07	0,2	–	0,8 d	246	173,201,217	unbekannt			

Auftraggeber
Projekt
Auftrag Nr.
Datum

Harress Pickel Consult AG
DU II Kesslergrube, Grenzach Wyhlen
A10-01194
21.09.2010

Anhang: **3**

Probenbezeichnung: P 2				Int. Probennummer: M1006-05225			
Interne Standards							
Nr.	Name des Internen		Konzentration	Wiederfindung (%)		Bemerkungen	
a	Anilin d5		1,1	22			
b	Nitrobenzol d5		1,1	69			
c	Naphthalin d8		1,1	74			
d	1-Chlorododecan		1,1	96			
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
3846	26,51	0,3 – 1,3 d	136	154,182,183	unbekannt		
3911	26,87	1,0 – 4,0 b	189		90	77-21-4	
3951	27,10	0,9 – 3,6 b	188	Antipyrine	91	60-80-0	
4006	27,40	0,2 – 0,7 d	235	Benzoic acid, 3,5-bis(1,1-dimethylethyl)-4-hydroxy-	85	1421-49-4	
4042	27,60	3,3 – 13,1 d	202	56,77,110	unbekannt		Sehr wenig Information im MS. besteht aus Phenyl + Teilstr. 110 u + Rest 15 u. Aromatisch. Geradz. Anz. N
4173	28,33	0,2 – 0,7 b	90	Benzenamine, 2-chloro-4-(methylsulfonyl)-	84	13244-35-4	oder Isomer
4190	28,42	1,5 – 5,9 b	215	Propylphenazone	87	NA	
4286	28,95	0,2 – 0,8 b	263	3,5-di-tert-Butyl-4-hydroxyphenylpropionic acid	86	20170-32-5	Ein Polymeradditiv
4327	29,18	0,3 – 1,1 d	235	96,109,281	unbekannt		
4360	29,36	0,4 – 1,4 d	64	Cyclic octaatomic sulfur	92	10544-50-0	
4443	29,82	0,4 – 1,7 b	169	a,a-Bis[2-cyanoethyl]-benzylcyanide	99		Wiley9
4464	29,94	0,3 – 1,2 d	43	97,99,171	unbekannt		
4724	31,38	0,2 – 0,8 b	168	2-Aminodiphenylsulfone	90	4273-98-7	
4855	32,11	1,1 – 4,3 b	137	Carbazole carboxylic acid		6311-19-9	Wiley9, oder Isomer
4923	32,48	0,5 – 1,9 d	159	Benzene, 1,1'-sulfonylbis[4-chloro-	84	80-07-9	
4980	32,80	0,2 – 0,9 d	112	10,92,93	unbekannt		Hinweis auf ein Sulfonamid
5149	33,74	0,9 – 3,7 d	136	122,236,281	unbekannt		
5367	34,95	0,5 – 2,0 d	193	194,239,323	unbekannt		
5430	35,29	0,6 – 2,3 d	178	160,164,206	unbekannt		
5634	36,43	0,2 – 0,8 b	277	Triphenylphosphine oxide	90	791-28-6	
5863	37,69	0,2 – 0,8 b	255	1,1'-Biisoquinoline	73	17999-93-8	
5972	38,30	0,5 – 1,8 d	113	43,59,243	unbekannt		Hinweis auf zuckerähnliche Verbindung
6089	38,95	1,0 – 3,8 d	113	43,101,243	unbekannt		Hinweis auf zuckerähnliche Verbindung
6133	39,19	0,8 – 3,2 d	113	43,101,243	unbekannt		Hinweis auf zuckerähnliche Verbindung
6602	41,79	0,4 – 1,7 d	317	197,300,318	unbekannt		
6848	43,15	0,1 – 0,4 d	207	297,311,312	unbekannt		

Aufkonzentrierungsfaktor: 1254
Bestimmungsgrenze in µg/l (Naphthalin d8): 0,2

Rot und Kursiv: Kommentare von Prof. Dr. M. Oehme (Institut für Angewandte Analytische Chemie, Niederteufen, Schweiz)

Auftraggeber
Projekt
Auftrag Nr.
Datum

Harress Pickel Consult AG
DU II Kesslergrube, Grenzach Wyhlen
A10-01194
26.08.2010

Anhang: **4**

Probenbezeichnung: P 10 a				Int. Probennummer:		M1006-05226	
Interne Standards							
Nr.	Name des Internen	Konzentration	Wiederfindung (%)		Bemerkungen		
a	Anilin d5	1,1	46				
b	Nitrobenzol d5	1,1	93				
c	Naphthalin d8	1,1	96				
d	1-Chlorododecan	1,1	99				
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
							keine Substanzen nachweisbar

Aufkonzentrierungsfaktor: 1104
Bestimmungsgrenze in µg/l (Naphthalin d8): 0,05

Auftraggeber
Projekt
Auftrag Nr.
Datum

Harress Pickel Consult AG
DU II Kesslergrube, Grenzach Wyhlen
A10-01194
30.09.2010

Anhang: **5**

Probenbezeichnung: KE 21						Int. Probennummer:		M1006-05227		
Interne Standards										
Nr.	Name des Internen		Konzentration		Wiederfindung (%)		Bemerkungen			
a	Anilin d5		1,1		32					
b	Nitrobenzol d5		1,1		77					
c	Naphthalin d8		1,1		93					
d	1-Chlorododecan		1,1		89					
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
209	6,35	0,3	–	1,3 b	91		Benzene, 1-chloro-2-methyl-	89	95-49-8	oder Isomer
516	8,06	0,8	–	3,3 b	146		Benzene, 1,3-dichloro-	94	541-73-1	oder Isomer
555	8,27	0,8	–	3,1 b	146		Benzene, 1,3-dichloro-	93	541-73-1	oder Isomer
678	8,95	1,2	–	4,8 b	146		Benzene, 1,4-dichloro-	95	106-46-7	oder Isomer
853	9,92	0,1	–	0,5 b	106		Aniline, N-methyl-	83	100-61-8	
915	10,27	0,4	–	1,6 b	106		p-Aminotoluene	91	106-49-0	oder Isomer
1001	10,74	1,1	–	4,4 d	81	67,79,82	unbekannt			Hinweis auf alkylsubstituiertes Cyclohexen oder Isomer
1152	11,58	0,4	–	1,5 b	127		o-Chloroaniline	91	95-51-2	oder Isomer
1169	11,67	1,2	–	4,7 d	99		Triethyl phosphate	92	78-40-0	
1272	12,25	4,1	–	16,2 b	110		Phenol, 2-ethoxy-	91	94-71-3	oder Isomer
1482	13,41	1,7	–	6,9 b	127		m-Chloroaniline	93	108-42-9	oder Isomer
1497	13,49	0,4	–	1,5 b	127		p-Chloroaniline	90	106-47-8	oder Isomer
1713	14,69	0,2	–	1,0 b	117		2-Phenylbutyronitrile	89	69350-73-8	
1721	14,73	0,5	–	2,0 b	124		2-Ethoxy-4-methylphenol	89	2563-07-7	
1777	15,04	0,3	–	1,0 b	158		4-Chloro-2-methylthiophenol	88	17178-01-7	
1817	15,27	0,2	–	0,8 d	107	77,79,148	unbekannt			
1875	15,59	1,8	–	7,3 b	141		Benzenamine, 3-chloro-2-methyl-	90	87-60-5	oder Isomer
1905	15,75	1,9	–	7,7 b	141		Benzenamine, 4-chloro-2-methyl-	90	95-69-2	oder Isomer
2038	16,49	1,2	–	4,8 b	161		Benzenamine, 2,5-dichloro-	93	95-82-9	oder Isomer
2101	16,84	1,9	–	7,6 b	144	91,116,173	unbekannt			
2268	17,77	0,1	–	0,5 d	77	94,141,156	unbekannt			
2307	17,98	4,1	–	16,5 b	135		Phenol, 4-(1,1-dimethylpropyl)-	92	80-46-6	
2365	18,30	0,2	–	0,9 d	108	124,160,175	unbekannt			
2395	18,47	0,6	–	2,2 d	95	43,109,137	unbekannt			
2427	18,65	1,7	–	6,7 b	161		Benzenamine, 3,4-dichloro-	92	95-76-1	oder Isomer
2683	20,07	1,0	–	4,1 d	136	91,122,167	unbekannt			
2713	20,23	0,6	–	2,4 d	92	107,121,122	unbekannt			
2750	20,44	0,2	–	0,9 d	163	107,134,205	unbekannt			
2775	20,58	0,2	–	0,7 d	141	55,98,126	unbekannt			
2808	20,76	7,4	–	29,7 c	143		1-Naphthalenamine	91	134-32-7	
2844	20,96	1,4	–	5,8 b	111		Benzene, 1-chloro-4-(methylsulfonyl)-	81	98-57-7	
2881	21,16	1,2	–	4,7 b	140		Methyprylon	84	125-64-4	
2957	21,59	0,2	–	0,8 d	110	111,138,183	unbekannt			
3011	21,88	1,7	–	6,6 b	169		[1,1'-Biphenyl]-2-amine			oder Isomer
3076	22,25	11,5	–	46,1 d	43		(2,2,5,5-Tetramethyl-tetrahydro-1,3,4,6,8-pentaoxa-cyclopenta[a]inden-8a-yl)-methanol	87	NA	
3096	22,36	0,6	–	2,4 b	159		5-Amino-1-phenylpyrazole	90	826-85-7	
3138	22,59	0,9	–	3,8 d	90	89,91,106	unbekannt			
3188	22,87	3,4	–	13,7 b	91		Benzene, (1,1-diethylpropyl)-	83	4170-84-7	oder anderes alkylsubytiuiertes Benzol
3210	22,99	0,5	–	1,9 d	101		D-Mannitol, 1,2:3,4:5,6-tris-O-(1-methylethylidene)-			Hilfsstoff Formulierung
3258	23,25	0,2	–	0,8 d	91	106,107,176	unbekannt			
3278	23,36	1,9	–	7,6 b	91		Benzenesulfonamide, 4-methyl-	89	70-55-3	

Auftraggeber
Projekt
Auftrag Nr.
Datum

Harress Pickel Consult AG
DU II Kesslergrube, Grenzach Wyhlen
A10-01194
30.09.2010

Anhang: **5**

Probenbezeichnung: KE 21					Int. Probennummer: M1006-05227					
Interne Standards										
Nr.	Name des Internen		Konzentration		Wiederfindung (%)			Bemerkungen		
a	Anilin d5		1,1		32					
b	Nitrobenzol d5		1,1		77					
c	Naphthalin d8		1,1		93					
d	1-Chlorododecan		1,1		89					
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
3311	23,55	0,9	–	3,8 d	144	103,130,169	unbekannt			
3343	23,73	0,3	–	1,2 d	43		2,2,7,7-Tetramethyl-tetrahydro-bis[1,3]dioxolo[4,5-b;4',5'-d]pyran-3a-carboxylic acid	88	NA	
3365	23,85	0,2	–	0,8 d	137	108,109,136	unbekannt			
3435	24,24	0,6	–	2,5 d	59	43,71,131	unbekannt			Hinweis auf zuckerähnliche Verbindung
3462	24,38	0,2	–	0,7 d	131	43,73,114	unbekannt			
3483	24,50	0,1	–	0,6 d	123	43,137,154	unbekannt			
3509	24,65	0,1	–	0,3 d	131	72,73,135	unbekannt			
3525	24,73	1,3	–	5,3 d	43		2,2,5,5-Tetramethyldihydro-1,3,4,6,8-pentaoxacyclopenta[a]indene-3a-carboxylic acid	86	NA	
3546	24,85	0,2	–	0,8 d	134	43,138,223	unbekannt			
3575	25,01	0,3	–	1,0 d	91	65,155,212	unbekannt			
3615	25,23	0,2	–	0,8 d	43	59,144,171	unbekannt			
3652	25,44	0,9	–	3,4 d	43	109,150,195	unbekannt			
3678	25,58	5,4	–	21,8 d	174	77,142,216	unbekannt			Acetylgruppe an Tetrahydronaphthalin plus Alkylgruppen, MW216
3706	25,74	0,3	–	1,3 d	150	136,149,195	unbekannt			
3731	25,88	4,0	–	16,1 b	232		1-phenyl-3-methyl-4-hydroxy-(prop-2-yl)-2,5-dihydropyrazole-5-one	91		Wiley9
3767	26,08	0,3	–	1,4 d	246	173,201,217	unbekannt			
3787	26,19	1,8	–	7,1 b	216		Acetic acid, (2-phenylcyclohexylidene)-	83	19910-00-0	
3809	26,31	0,8	–	3,3 d	129	81,91,171	unbekannt			
3862	26,60	1,1	–	4,5 d	182	136,154,183	unbekannt			
3914	26,89	2,6	–	10,3 b	189		Glutethimide	88	77-21-4	
3964	27,17	2,6	–	10,4 b	188		Antipyrine	83	60-80-0	
4052	27,65	9,5	–	37,9 d	202	56,77,110	unbekannt			Sehr wenig Information im MS. besteht aus Phenyl + Teilstr. 110 u + Rest 15 u. Aromatisch. Geradz. Anz. N
4107	27,96	0,1	–	0,5 d	217	189,216,290	unbekannt			
4135	28,12	0,6	–	2,3 b	56		Aminopyrine	87	58-15-1	
4194	28,44	5,3	–	21,2 b	215		Propyphenazone	90	479-92-5	
4276	28,90	0,3	–	1,0 d	183	111,139,155	unbekannt			
4331	29,20	0,2	–	0,9 d	235	96,109,281	unbekannt			
4360	29,36	0,4	–	1,5 d	64		Cyclic octaatomic sulfur	84	10544-50-0	
4425	29,72	0,2	–	0,8 d	189	77,105,107	unbekannt			
4451	29,87	1,2	–	5,0 d	169	115,129,142	unbekannt			
4478	30,02	0,5	–	2,0 b	230		Benz[c]isoxazole, 1,3-dihydro-5-chloro-3-phenyl-	82	NA	*nicht eindeutig, evtl. Methanone, (2-amino-5-chlorophenyl)phenyl-

Auftraggeber
Projekt
Auftrag Nr.
Datum

Harress Pickel Consult AG
DU II Kesslergrube, Grenzach Wyhlen
A10-01194
30.09.2010

Anhang: **5**

Probenbezeichnung: KE 21				Int. Probennummer: M1006-05227			
Interne Standards							
Nr.	Name des Internen	Konzentration	Wiederfindung (%)	Bemerkungen			
a	Anilin d5	1,1	32				
b	Nitrobenzol d5	1,1	77				
c	Naphthalin d8	1,1	93				
d	1-Chlorododecan	1,1	89				
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
4561	30,48	1,1 – 4,4 d	221	Heptabarbital	84	509-86-4	
4694	31,21	0,6 – 2,3 d	144	103,130,142 unbekannt			Enthält eine Alkyl-1-H-Indolstruktur
4725	31,39	0,05 – 0,2 d	168	Octadecanoic acid	80	57-11-4	
4773	31,65	0,2 – 0,8 d	91	119,135,162 unbekannt			
4821	31,92	0,3 – 1,2 d	204	231,232,274 unbekannt			
4870	32,19	0,4 – 1,5 d	249	93,137,193 unbekannt			
4887	32,28	1,0 – 3,9 d	144	137,145,193 unbekannt			
4926	32,50	3,7 – 14,8 b	159	Benzene, 1,1'-sulfonylbis[4-chloro-	82	80-07-9	
4982	32,81	0,3 – 1,1 d	112	70,92,93 unbekannt			
5015	32,99	0,2 – 0,9 d	144	145,188,201 unbekannt			
5192	33,97	0,9 – 3,6 d	136	122,193,236 unbekannt			
5345	34,82	0,3 – 1,3 d	129	57,70,71 unbekannt			
5370	34,96	0,7 – 2,6 d	193	194,239,323 unbekannt			
5460	35,46	0,5 – 1,9 d	135	136,178,249 unbekannt			
5646	36,49	0,6 – 2,5 b	277	Triphenylphosphine oxide	88	791-28-6	
5802	37,35	0,4 – 1,6 c	286	[1,1'-Binaphthalene]-2,2'-diol	87	602-09-5	
5864	37,70	0,2 – 0,8 d	255	128,226,256 unbekannt			
5972	38,30	0,4 – 1,8 d	113	43,59,243 unbekannt			Hinweis auf zuckerähnliche Verbindung
6010	38,51	0,3 – 1,0 d	113	43,59,73 unbekannt			Hinweis auf zuckerähnliche Verbindung
6090	38,95	1,1 – 4,2 d	113	43,101,243 unbekannt			Hinweis auf zuckerähnliche Verbindung
6133	39,19	1,0 – 4,0 d	113	43,101,243 unbekannt			Hinweis auf zuckerähnliche Verbindung
6182	39,46	0,3 – 1,0 d	113	43,59,243 unbekannt			
6201	39,57	2,9 – 11,4 d	0	13-Docosenamide, (Z)-	86	112-84-5	
6255	39,87	0,3 – 1,1 d	59	43,72,113 unbekannt			
6681	42,23	0,5 – 2,2 d	182	72,300,317 unbekannt			

Aufkonzentrierungsfaktor: 1250

Bestimmungsgrenze in µg/l (Naphthalin d8): 0,10

Die Bestimmungsgrenze wurde anhand der von Prof. Dr. M. Oehme zusätzlich identifizierten Substanzen angepasst.

Rot und Kursiv: Kommentare von Prof. Dr. M. Oehme (Institut für Angewandte Analytische Chemie, Niederteufen, Schweiz)

Auftraggeber
Projekt
Auftrag Nr.
Datum

Harress Pickel Consult AG
DU II Kesslergrube, Grenzach Wyhlen
A10-01194
23.09.2010

Anhang: **6**

Probenbezeichnung: KE 35						Int. Probennummer:				M1006-05228		
Interne Standards												
Nr.		Name des Internen				Konzentration		Wiederfindung (%)		Bemerkungen		
a		Anilin d5				1,1		27				
b		Nitrobenzol d5				1,1		60				
c		Naphthalin d8				1,1		68				
d		1-Chlorododecan				1,1		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
208	6,35	0,2	–	0,9	b	91		Benzene, 1-chloro-2-methyl-	89	95-49-8	oder Isomer	
678	8,95	0,2	–	0,9	b	146		Benzene, 1,2-dichloro-	92	95-50-1	* Koelution, oder Isomer	
681	8,97	0,2	–	0,6	d	83	43,141,146	unbekannt				
853	9,92	0,10	–	0,4	b	106		Aniline, N-methyl-	85	100-61-8		
906	10,22	0,3	–	1,2	d	71	43,45,73	unbekannt				
1002	10,75	0,8	–	3,2	d	81	67,79,82	unbekannt			Hinweis auf alkylsubstituiertes Cyclohexen oder Isomer	
1275	12,26	0,6	–	2,5	b	110		Phenol, 2-ethoxy-	91	94-71-3		
1485	13,43	0,3	–	1,1	b	127		p-Chloroaniline	81	106-47-8	oder Isomer	
1622	14,19	0,14	–	0,6	d	101	98,129,144	unbekannt				
1668	14,44	0,14	–	0,5	d	69	68,97,140	unbekannt			Hinweis auf substituiertes Cycloalkanon	
1689	14,56	0,2	–	0,7	d	97	68,69,140	unbekannt			Hinweis auf Terpenoid	
1742	14,85	0,9	–	3,7	b	135		Benzenamine, 2,4,6-trimethyl-	93	88-05-1	oder Isomer	
1777	15,05	0,2	–	0,6	b	158		4-Chloro-2-methylthiophenol	82	17178-01-7	oder Isomer	
1876	15,60	0,3	–	1,4	d	97	57,113,141	unbekannt			Vermutlich Abbauprodukt Cellulose/Zucker	
1907	15,77	0,13	–	0,5	d	141	106,135,140	unbekannt				
1935	15,92	0,08	–	0,3	d	109	43,72,107	unbekannt				
1998	16,27	0,12	–	0,5	d	94	43,95,178	unbekannt				
2039	16,50	0,4	–	1,8	d	161	43,98,163	unbekannt			Teilstruktur (Dichlorbenzol + N)	
2063	16,63	0,6	–	2,2	d	109	43,124,152	unbekannt				
2089	16,78	0,08	–	0,3	d	43	85,151,152	unbekannt				
2104	16,86	0,07	–	0,3	d	144	106,107,134	unbekannt				
2148	17,10	1,1	–	4,2	b	135		Phenol, 2,3,4,6-tetramethyl-	91	3238-38-8	oder Isomer	
2227	17,54	0,3	–	1,1	d	101	43,116,172	unbekannt				
2268	17,77	0,3	–	1,1	d	165	110,151,180	unbekannt				
2287	17,87	0,09	–	0,3	d	69	55,111,124	unbekannt				
2308	17,99	0,5	–	1,8	d	135	69,107,124	unbekannt				
2335	18,14	2,0	–	8,0	d	124	96,123,180	unbekannt				
2358	18,27	1,3	–	5,4	d	98	43,101,116	unbekannt			Hinweis auf Terpenoid Verbindung	
2393	18,46	0,8	–	3,2	d	95	43,134,149	unbekannt				
2415	18,58	0,7	–	2,7	d	82	109,137,180	unbekannt			* Hinweis auf Cyclohexenon Verbindung	
2429	18,66	1,3	–	5,3	d	135	43,93,192	unbekannt			* Hinweis auf bicyclische Verbindung	
2445	18,75	0,5	–	1,8	d	82	95,109,137	unbekannt				
2486	18,98	0,14	–	0,6	d	137	43,93,138	unbekannt				
2515	19,14	0,2	–	1,0	d	73	43,93,107	unbekannt				
2537	19,26	0,07	–	0,3	d	70	43,55,69	unbekannt				
2560	19,39	0,11	–	0,5	d	43	95,123,140	unbekannt				
2622	19,73	0,5	–	2,0	d	153	151,152,154	unbekannt				

Auftraggeber
Projekt
Auftrag Nr.
Datum

Harress Pickel Consult AG
DU II Kesslergrube, Grenzach Wyhlen
A10-01194
23.09.2010

Anhang: **6**

Probenbezeichnung: KE 35					Int. Probennummer: M1006-05228					
Interne Standards										
Nr.	Name des Internen		Konzentration		Wiederfindung (%)		Bemerkungen			
a	Anilin d5		1,1		27					
b	Nitrobenzol d5		1,1		60					
c	Naphthalin d8		1,1		68					
d	1-Chlorododecan		1,1		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
2663	19,96	0,5	–	1,9 d	71	43,69,143	unbekannt			
2694	20,13	1,8	–	7,2 d	118	59,119,174	unbekannt			*Hinweis auf aromatische Verbindung
2712	20,23	4,7	–	18,7 d	123	137,152,180	unbekannt			Hinweis auf Terpenoid Verbindung
2728	20,32	0,12	–	0,5 d	138	55,69,139	unbekannt			
2753	20,46	0,6	–	2,3 d	95	43,69,109	unbekannt			
2774	20,57	0,4	–	1,5 d	73	55,69,141	unbekannt			
2806	20,75	0,5	–	2,0 c	143		1-Naphthalenamine	85	134-32-7	
2854	21,02	1,6	–	6,4 d	154	69,140,137	unbekannt			Keine aromatische Struktur
2869	21,10	0,7	–	2,9 d	97	69,123,137	unbekannt			
2883	21,18	0,9	–	3,4 d	140		Methyprylon	84	125-64-4	
2901	21,28	1,3	–	5,3 d	105	91,120,148	unbekannt			* Hinweis auf bicyclische Verbindung
2936	21,47	0,2	–	0,9 d	151	119,123,135	unbekannt			
2966	21,64	0,9	–	3,7 d	91	123,134,151	unbekannt			
3012	21,89	1,2	–	4,8 d	69	43,103,169	unbekannt			
3043	22,06	5,3	–	21,2 d	151	81,137,208	unbekannt			Hinweis auf Ethoxyanisaldehyd + Koelution
3071	22,22	3,5	–	13,8 d	245		(2,2,5,5-Tetramethyldihydro-1,3,4,6,8-pentaoxacyclopenta[a]inden-3a-yl)methanol	85	NA	
3113	22,45	0,1	–	0,5 d	103	43,181,182	unbekannt			
3185	22,85	3,2	–	12,8 d	91	95,105,147	unbekannt			
3235	23,13	0,8	–	3,3 d	139	125,152,153	unbekannt			
3278	23,37	3,5	–	13,9 d	95		Cyclohexanebutanoic acid, 2,2-dimethyl-6-methylene-, methyl ester	83	95452-15-6	oder Isomer
3323	23,62	2,3	–	9,1 d	125	43,124,126	unbekannt			
3365	23,85	0,2	–	0,7 d	43	69,109,207	unbekannt			
3397	24,03	0,5	–	2,0 d	134	91,147,190	unbekannt			
3438	24,25	2,1	–	8,3 d	125	43,93,121	unbekannt			
3465	24,40	1,1	–	4,3 d	139	43,69,111	unbekannt			
3482	24,50	1,2	–	4,6 d	82	110,123,137	unbekannt			
3512	24,66	1,8	–	7,0 d	123	122,133,134	unbekannt			
3573	25,00	1,0	–	4,0 d	137	43,91,204	unbekannt			
3633	25,33	8,3	–	33,2 d	89	43,61,69	unbekannt			
3659	25,48	2,0	–	8,0 d	207	150,151,178	unbekannt			Bis 178 u wie Tetrahydronaphthalin (CAS 54549-75-9) + 45 u (-COOH, aromatisch (M-17, M-45)) + Rest

Auftraggeber
Projekt
Auftrag Nr.
Datum

Harress Pickel Consult AG
DU II Kesslergrube, Grenzach Wyhlen
A10-01194
23.09.2010

Anhang: **6**

Probenbezeichnung: KE 35				Int. Probennummer: M1006-05228				
Interne Standards								
Nr.	Name des Internen	Konzentration	Wiederfindung (%)		Bemerkungen			
a	Anilin d5	1,1	27					
b	Nitrobenzol d5	1,1	60					
c	Naphthalin d8	1,1	68					
d	1-Chlorododecan	1,1	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
3677	25,58	1,4 – 5,4 d	174	77,173,216	unbekannt			Acetylgruppe an Tetrahydronaphthalin plus Alkylgruppen, MW216
3694	25,67	0,4 – 1,5 d	109	91,95,123	unbekannt			
3730	25,87	1,6 – 6,6 d	93		1-phenyl-3-methyl-4-hydroxy-(prop-2-yl)-2,5-dihydropyrazole-5-one	92		Wiley9
3746	25,96	1,6 – 6,2 d	207	150,151,152	unbekannt			Isomer zu Scan 3677
3763	26,05	1,4 – 5,6 d	137	103,165,208	unbekannt			
3808	26,30	0,6 – 2,5 d	103	43,75,94	unbekannt			
3822	26,38	0,9 – 3,7 d	123	95,124,246	unbekannt			
3846	26,51	1,0 – 3,9 d	182	43,136,154	unbekannt			
3864	26,61	0,5 – 1,9 d	43	69,95,147	unbekannt			
3886	26,74	0,12 – 0,5 d	235	43,178,205	unbekannt			
3915	26,90	2,6 – 10,4 d	189	91,121,149	unbekannt			
3942	27,05	1,6 – 6,2 d	181	164,179,196	unbekannt			
3976	27,24	0,3 – 1,3 d	211	95,123,137	unbekannt			
3993	27,33	0,06 – 0,3 d	95	43,123,137	unbekannt			
4016	27,46	0,4 – 1,7 d	178	43,67,179	unbekannt			
4043	27,61	2,2 – 8,7 d	202	56,77,110	unbekannt			Sehr wenig Info in MS, besteht aus Phenyl plus Teilstruktur 110 u plus Rest 15 u. Aromatisch, gerade Anzahl N
4078	27,80	1,1 – 4,3 d	179	87,137,207	unbekannt			
4139	28,14	1,1 – 4,3 d	155	43,69,127	unbekannt			
4193	28,44	6,4 – 25,8 b	215		Propylphenazone	86	NA	
4221	28,59	0,2 – 0,8 d	89	43,61,123	unbekannt			
4251	28,76	0,2 – 0,9 d	207	43,179,235	unbekannt			
4278	28,91	5,6 – 22,3 d	183	97,155,184	unbekannt			
4311	29,09	4,1 – 16,4 d	183	97,155,184	unbekannt			
4359	29,36	0,2 – 1,0 d	133	64,103,148	unbekannt			
4415	29,67	1,7 – 6,7 d	148	135,147,192	unbekannt			
4449	29,86	0,97 – 3,9 d	169	115,129,142	unbekannt			
4479	30,02	2,9 – 11,6 b	230		Benz[c]isoxazole, 1,3-dihydro-5-chloro-3-phenyl-	92	NA	Nicht eindeutig, evtl. 2-amino-5-chlorophenyl) phenyl-methanone
4501	30,15	1,4 – 5,7 d	181	152,165,210	unbekannt			
4602	30,70	3,0 – 11,8 d	253		2-methyl-4-phenyl-6-chloro-benzo[3]1,3-diazine	95		oder Isomer, Wiley9
4639	30,91	0,2 – 0,6 d	139	55,69,125	unbekannt			
4666	31,06	0,2 – 0,8 d	235	43,205,233	unbekannt			

Auftraggeber
Projekt
Auftrag Nr.
Datum

Harress Pickel Consult AG
DU II Kesslergrube, Grenzach Wyhlen
A10-01194
23.09.2010

Anhang: **6**

Probenbezeichnung: KE 35					Int. Probennummer:					M1006-05228					
Interne Standards															
Nr.		Name des Internen			Konzentration		Wiederfindung (%)			Bemerkungen					
a		Anilin d5			1,1		27								
b		Nitrobenzol d5			1,1		60								
c		Naphthalin d8			1,1		68								
d		1-Chlorododecan			1,1		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			
4686	31,17	0,8	–	3,4	b	193		5-Acetyl-5H-dibenz[b,f]azepine			81	19209-60-0			
4771	31,64	0,12	–	0,5	d	91	105,119,135	unbekannt							
4805	31,83	0,6	–	2,3	d	179	165,178,223	unbekannt							
4862	32,15	0,3	–	1,0	d	195	137,165,166	unbekannt							
4877	32,23	0,5	–	1,9	d	137	165,166,193	unbekannt							
4923	32,48	0,12	–	0,5	d	159	75,161,230	unbekannt							
4955	32,66	0,09	–	0,3	d	180	43,181,209	unbekannt							
5013	32,98	0,12	–	0,5	d	201	43,69,188	unbekannt							
5046	33,17	0,13	–	0,5	d	234	165,195,249	unbekannt							
5064	33,27	0,08	–	0,3	d	181	43,135,161	unbekannt							
5150	33,74	0,8	–	3,0	d	183	69,91,95	unbekannt							
5188	33,95	0,12	–	0,5	d	95	43,69,71	unbekannt							
5209	34,07	0,3	–	1,1	d	233	133,205,232	unbekannt							
5231	34,19	0,4	–	1,4	d	183	71,112,182	unbekannt							
5262	34,36	0,3	–	1,3	d	135	69,95,150	unbekannt							
5275	34,44	0,3	–	1,4	d	147	77,135,224	unbekannt							
5369	34,96	0,6	–	2,4	d	193	194,239,323	unbekannt							
5428	35,28	0,2	–	0,9	d	178	43,69,206	unbekannt							
5464	35,48	0,11	–	0,4	d	135	91,95,136	unbekannt							
5519	35,79	0,09	–	0,4	d	123	43,95,137	unbekannt							
5641	36,46	7,1	–	28,5	b	277		Triphenylphosphine oxide			91	791-28-6			
5720	36,90	0,6	–	2,3	b	242		Nordazepam			84	1088-11-5			
5785	37,26	0,6	–	2,6	d	181	183,257,258	unbekannt							
5864	37,70	0,14	–	0,5	d	255	113,226,256	unbekannt							
5886	37,82	0,10	–	0,4	d	236	43,179,222	unbekannt							
5972	38,30	0,11	–	0,4	d	113	43,69,243	unbekannt							
6011	38,51	0,08	–	0,3	d	43	69,77,97	unbekannt							
6090	38,95	0,4	–	1,7	d	113	43,101,243	unbekannt							
6134	39,20	0,4	–	1,6	d	113	43,101,243	unbekannt							

Aufkonzentrierungsfaktor: 1513
Bestimmungsgrenze in µg/l (Naphthalin d8): 0,1

Rot und Kursiv: Kommentare von Prof. Dr. M. Oehme (Institut für Angewandte Analytische Chemie, Niederteufen, Schweiz)

Auftraggeber
Projekt
Auftrag Nr.
Datum

Harress Pickel Consult AG
DU II Kesslergrube, Grenzach Wyhlen
A10-01194
26.08.2010

Anhang: **7**

Probenbezeichnung: Blind 27.06.				Int. Probennummer:		M1006-05229		
Interne Standards								
Nr.	Name des Internen	Konzentration	Wiederfindung (%)		Bemerkungen			
a	Anilin d5	1,1	32					
b	Nitrobenzol d5	1,1	81					
c	Naphthalin d8	1,1	84					
d	1-Chlorododecan	1,1	94					
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
								keine Substanzen nachweisbar

Aufkonzentrierungsfaktor: 1123
Bestimmungsgrenze in µg/l (Naphthalin d8): 0,05



Labors: Analytik, Ökotoxikologie,
Verfahrenstechnik

ANALYSEN-BERICHT

HPC Harress Pickel Consult AG
Martin Steckermeier
Nansenstrasse 5
79539 Lörrach

Schlieren, 14. Oktober 2010

Projekt: DU II "Kesslergrube", Grenzach-Wyhlen
BMG Auftragsnummer: A10-01239
Datum Auftrag: 5. Juli 2010
Datum Analysen: 6. Juli - 26. August 2010

Probenliste & Untersuchungsauftrag

Anzahl Proben 7

Parameter	Anz.	Bestimmungsmethode	BMG SAA-Nr
Screening organische Substanzen	7	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.bmgeng.ch

Seite 1 von 3



S SCHWEIZERISCHER PRÜFSTELLENDIENST
T SERVICE D'ESSAI
T SERVIZIO DIE PROVA IN SVIZZERA
S SWISS TESTING SERVICE STS-No. 168

Auftraggeber
Projekt
Auftrag Nr.
Datum Bericht

HPC Harress Pickel Consult AG
DU II "Kesslergrube", Grenzach-Wyhlen
A10-01239
14.10.2010

Probenbezeichnung	Blindprobe 22	KE 20	Blindprobe 24	KE 33		
Tiefe						
Datum Probenahme	02.07.2010	02.07.2010	05.07.2010	05.07.2010		
Interne Probenbezeichnung	M1007-05391	M1007-05392	M1007-05393	M1007-05394		
Datum Probeneingang	02.07.2010	02.07.2010	05.07.2010	05.07.2010		
Probenart	Wasser	Wasser	Wasser	Wasser		
Organische Summenparameter						
Screening organische Substanzen	siehe Anhang 1	siehe Anhang 2	siehe Anhang 3	siehe Anhang 4		

Probenbezeichnung	KE 32	Blindprobe 23	KE 36			
Tiefe						
Datum Probenahme	05.07.2010	05.07.2010	05.07.2010			
Interne Probenbezeichnung	M1007-05395	M1007-05396	M1007-05397			
Datum Probeneingang	05.07.2010	05.07.2010	05.07.2010			
Probenart	Wasser	Wasser	Wasser			
Organische Summenparameter						
Screening organische Substanzen	siehe Anhang 5	siehe Anhang 6	siehe Anhang 7			

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	<div> Gaschromatograph: Säule: Injektion: Temperaturprogramm: Massenselektiver Detektor: Ionisierung: Massen: Scangeschwindigkeit Bibliothek: </div> <div> Finnigan: Trace Ultra DB5ms, 30m x 0.25 mm, 0.25 µm 2 µl; Splitless 40°C, 2 Min.; 6°C/Min bis 280°C; 10°C bis 300°C; 6 Min. Single Quadrupole EI; 70 eV 33 - 500 m/z 3 Scans/Sek. NIST 08 </div>



Labors: Analytik, Ökotoxikologie,
Verfahrenstechnik

Generelle Bemerkungen zu den Screenings

Alle Identifikationen sind tentativ, solange diese nicht mit Referenzverbindungen bestätigt worden sind.

% 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

Harress Pickel Consult AG
DU II Kesslergrube, Grenzach Wyhlen
A10-01239
06.10.2010

Anhang: **1**

Probenbezeichnung: Blindprobe 22				Int. Probennummer:		M1007-05391		
Interne Standards								
Nr.	Name des Internen		Konzentration	Wiederfindung (%)		Bemerkungen		
a	Anilin d5		1,1	35				
b	Nitrobenzol d5		1,1	70				
c	Naphthalin d8		1,1	75				
d	1-Chlorododecan		1,1	89				
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
3932	26,99	0,11 – 0,5 d	57	73,171,254	unbekannt			Zuckerähnlich
4138	28,13	0,05 – 0,2 b	277		Benzenepropanoic acid, 3,5-bis(1,1-dimethylethyl)-4-hydroxy-, methyl ester	75	6386-38-5	ein Polymeradditiv (Radikalfänger)
4741	31,48	0,06 – 0,2 d	73		Octadecanoic acid	85	57-11-4	allgem. Kontamination, Quelle unbekannt
5231	34,19	0,04 – 0,2 d	59	44,67,95	unbekannt			Nicht identifizierbar, Quelle unbekannt
5736	36,99	0,03 – 0,11 d	59		9-Octadecenamide	61	3322-62-1	Octadecenamid oder Homolog, bekannte Kontaminante, Herkunft unbekannt

Aufkonzentrierungsfaktor: 907
Bestimmungsgrenze in µg/l (Naphthalin d8): 0,050

Die Bestimmungsgrenze wurde anhand der von Prof. Dr. M. Oehme zusätzlich identifizierten Substanzen angepasst.

Rot und Kursiv: Kommentare von Prof. Dr. M. Oehme (Institut für Angewandte Analytische Chemie, Niederteufen, Schweiz)

Auftraggeber
Projekt
Auftrag Nr.
Datum

Harress Pickel Consult AG
DU II Kesslergrube, Grenzach Wyhlen
A10-01239
06.10.2010

Anhang: **2**

Probenbezeichnung: KE 20						Int. Probennummer: M1007-05392						
Interne Standards												
Nr.		Name des Internen		Konzentration		Wiederfindung (%)		Bemerkungen				
a		Anilin d5		1,1		21						
b		Nitrobenzol d5		1,1		59						
c		Naphthalin d8		1,1		56						
d		1-Chlorododecan		1,1		116						
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
859	9,96	0,1	–	0,5	b	106		p-Aminotoluene		91	106-49-0	oder Isomer
891	10,14	0,1	–	0,6	b	106		Aniline, N-methyl-		94	100-61-8	oder Isomer
911	10,25	0,2	–	0,7	d	71	43,45,73	unbekannt				
1002	10,75	0,7	–	2,7	d	81	54,67,82	unbekannt				Alkylsubst. Cyclohexen oder Isomer
1274	12,26	1,4	–	5,6	b	110		Phenol, 2-ethoxy-		90	94-71-3	
1667	14,44	0,1	–	0,6	d	69	68,97,140	unbekannt				Cyclisch, gesättigt, O-haltig (Terpenoid?)
1688	14,55	0,2	–	0,7	d	97	68,69,140	unbekannt				Cyclisch, gesättigt, O-haltig (Terpenoid?)
1740	14,84	2,6	–	10,2	b	135		Benzenamine, 2,4,6-trimethyl-		93	88-05-1	
1775	15,04	0,4	–	1,7	b	158		4-Chloro-2-methylthiophenol		84	17178-01-7	
1874	15,58	0,4	–	1,8	d	97	57,113,141	unbekannt				Vermutlich Abbauprodukt von Cellulose
1905	15,76	0,9	–	3,8	b	141		Benzenamine, 3-chloro-4-methyl-		84	95-74-9	oder Isomer
1930	15,89	0,1	–	0,5	d	109	43,106,107	unbekannt				
1996	16,26	0,1	–	0,6	d	94	43,135,139	unbekannt				
2037	16,49	1,6	–	6,4	b	161		Benzenamine, 2,4-dichloro-		80	554-00-7	oder Isomer, plus Interferenz m/z 98 etc.
2062	16,63	0,7	–	2,7	d	109	43,124,152	unbekannt				
2102	16,85	0,3	–	1,3	d	144	103,134,173	unbekannt				
2147	17,10	1,0	–	4,0	b	135		Phenol, 2,3,4,6-tetramethyl-		87	3238-38-8	
2225	17,53	0,3	–	1,2	d	101	43,116,172	unbekannt				
2267	17,76	0,3	–	1,2	d	165	110,151,180	unbekannt				
2283	17,85	0,1	–	0,5	d	124	69,123,152	unbekannt				
2307	17,98	0,9	–	3,6	d	135	69,107,124	unbekannt				
2333	18,13	2,1	–	8,6	d	124	96,123,180	unbekannt				
2356	18,26	1,5	–	6,0	d	98	43,101,116	unbekannt				Vermutlich Terpenoid
2392	18,45	0,8	–	3,3	d	95	43,134,149	unbekannt				
2414	18,58	2,4	–	9,5	b	82	95,109,137	unbekannt				Ein substituiertes Cyclohexanon oder ähnlich
2427	18,65	1,6	–	6,3	d	135	91,161,163	unbekannt				Teilstruktur Dichlorbenzol plus N
2484	18,97	0,1	–	0,4	d	137	43,93,138	unbekannt				
2512	19,12	0,2	–	0,8	d	43	98,107,141	unbekannt				
2621	19,72	0,9	–	3,5	d	153	137,152,154	unbekannt				
2662	19,95	0,3	–	1,4	d	43	69,71,83	unbekannt				
2692	20,12	2,3	–	9,1	d	118	59,119,174	unbekannt				Ein Benzoessäurebenzylester plus Substituenten
2710	20,22	5,3	–	21,3	d	123	137,157,180	unbekannt				Terpenoid
2727	20,31	0,1	–	0,5	d	138	55,69,139	unbekannt				
2751	20,44	0,7	–	2,7	d	95	43,69,109	unbekannt				
2773	20,57	0,6	–	2,3	d	141	55,98,126	unbekannt				
2805	20,74	1,6	–	6,5	c	143		1-Naphthalenamine		89	134-32-7	
2853	21,01	1,3	–	5,1	d	137	69,97,183	unbekannt				
2867	21,09	0,7	–	2,6	d	97	69,123,137	unbekannt				
2884	21,18	1,6	–	6,5	d	140	83,98,155	unbekannt				
2900	21,27	1,4	–	5,8	d	105	91,120,148	unbekannt				Benzoylverbindung

Auftraggeber
Projekt
Auftrag Nr.
Datum

Harress Pickel Consult AG
DU II Kesslergrube, Grenzach Wyhlen
A10-01239
06.10.2010

Anhang: **2**

Probenbezeichnung: KE 20				Int. Probennummer: M1007-05392						
Interne Standards										
Nr.		Name des Internen		Konzentration		Wiederfindung (%)		Bemerkungen		
a		Anilin d5		1,1		21				
b		Nitrobenzol d5		1,1		59				
c		Naphthalin d8		1,1		56				
d		1-Chlorododecan		1,1		116				
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
2917	21,36	0,1	–	0,3 d	161	43,97,176	unbekannt			
2934	21,46	0,3	–	1,1 d	151	119,123,135	unbekannt			
2964	21,63	1,1	–	4,2 d	91	134,135,151	unbekannt			
3010	21,88	1,9	–	7,5 d	116	43,168,169	unbekannt			
3041	22,05	6,1	–	24,5 d	151	81,137,208	unbekannt			MW 208. CAS 120-25-2 (Ethoxyanisoaldehyd) + Ethylgruppe
3064	22,18	2,3	–	9,2 d	166	130,165,168	unbekannt			
3114	22,46	0,2	–	0,9 d	169	43,168,181	unbekannt			
3155	22,68	0,3	–	1,1 d	182	69,97,111	unbekannt			
3185	22,85	2,4	–	9,4 d	91	69,105,147,	unbekannt			
3233	23,12	1,0	–	4,0 d	139	125,152,153	unbekannt			
3270	23,32	2,6	–	10,3 d	91	69,95,107	unbekannt			Terpenoid
3322	23,61	3,6	–	14,3 d	125	43,124,126	unbekannt			
3364	23,84	0,2	–	0,8 d	207	41,43,109	unbekannt			
3383	23,95	0,2	–	0,9 d	148	43,99,105	unbekannt			
3397	24,03	0,2	–	0,9 d	134	91,147,190	unbekannt			
3441	24,27	1,9	–	7,4 d	125	43,93,97	unbekannt			
3458	24,36	0,3	–	1,2 d	185	43,69,139	unbekannt			
3479	24,48	1,0	–	3,8 d	82	110,137,209	unbekannt			
3511	24,66	1,4	–	5,5 d	123	119,133,207	unbekannt			
3572	25,00	2,1	–	8,5 d	137	43,91,204	unbekannt			
3632	25,33	7,8	–	31,1 d	89	61	unbekannt			
3659	25,48	3,3	–	13,3 d	207	150,151,178	unbekannt			Teilstruktur 178 u ähnlich Tetrahydronaphthalen (z.B. CAS 54549-75-9) + 45 u (-COOH an Aromat (M-17, M-45) + Rest
3677	25,58	8,2	–	33,0 d	174	77,173,216	unbekannt			Acetyl an vermutlich Tetrahydronaphthalin + Alkylgruppen
3711	25,77	0,2	–	0,9 d	136	91,164,206	unbekannt			
3731	25,88	17,7	–	70,7 b	232		1-phenyl-3-methyl-4-hydroxy-(prop-2-yl)-2,5-dihydropyrazole-5-one	91	0,00	Wiley9
3762	26,05	1,4	–	5,6 d	137	43,165,208	unbekannt			
3780	26,15	0,1	–	0,3 d	43	93,95,161	unbekannt			
3795	26,23	0,4	–	1,5 d	123	43,91,105	unbekannt			
3821	26,38	2,1	–	8,2 d	123	95,124,246	unbekannt			
3847	26,52	1,3	–	5,4 d	182	136,154,183	unbekannt			
3885	26,73	0,2	–	0,6 d	235	43,178,205	unbekannt			
3913	26,89	6,2	–	24,7 b	189		3-ethyl-3-phenyl-2,6-piperidinedione		77-21-4	oder Homolog
3941	27,04	1,8	–	7,3 d	181	179,196,225	unbekannt			
3975	27,23	0,5	–	2,0 d	95	91,229,244	unbekannt			
3991	27,32	0,1	–	0,3 d	43	95,123,137	unbekannt			
4015	27,45	0,3	–	1,3 d	178	43,67,179	unbekannt			

Auftraggeber
Projekt
Auftrag Nr.
Datum

Harress Pickel Consult AG
DU II Kesslergrube, Grenzach Wyhlen
A10-01239
06.10.2010

Anhang: **2**

Probenbezeichnung: KE 20				Int. Probennummer: M1007-05392						
Interne Standards										
Nr.		Name des Internen		Konzentration		Wiederfindung (%)		Bemerkungen		
a		Anilin d5		1,1		21				
b		Nitrobenzol d5		1,1		59				
c		Naphthalin d8		1,1		56				
d		1-Chlorododecan		1,1		116				
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
4043	27,61	3,7	– 14,7 d	202	56,77,110	unbekannt				Sehr wenig Information im MS. besteht aus Phenyl + Teilst. 110 u + Rest 15 u. Aromatisch. Geradz. Anz. N. A
4077	27,79	0,8	– 3,3 d	179	81,137,207	unbekannt				
4119	28,03	0,2	– 0,7 d	183	43,69,109	unbekannt				
4137	28,13	1,1	– 4,4 d	155	43,69,127	unbekannt				
4193	28,44	23,5	– 94,1 b	215		Propyphenazone		89	479-92-5	
4221	28,59	0,3	– 1,2 d	123	43,61,89	unbekannt				
4250	28,75	0,1	– 0,5 d	207	43,95,179	unbekannt				
4276	28,90	6,4	– 25,4 d	183	97,155,184	unbekannt				
4310	29,09	4,8	– 19,2 d	183	97,155,184	unbekannt				
4332	29,21	0,1	– 0,3 d	103	43,69,109	unbekannt				
4358	29,35	1,3	– 5,1 d	64		Cyclic octaatomic sulfur		83	10544-50-0	
4420	29,70	1,7	– 6,9 d	148	135,187,192	unbekannt				
4434	29,77	1,0	– 3,9 d	148	135,147,192	unbekannt				
4451	29,87	1,9	– 7,5 d	169	115,129,142	unbekannt				
4479	30,02	12,5	– 50,2 b	230		Benz[c]isoxazole, 1,3-dihydro-5-chloro-3-phenyl-		93	NA	Nicht eindeutig, evtl. 2-amino-5-chlorophenyl) phenyl-methanone
4500	30,14	2,4	– 9,6 d	181	152,165,210	unbekannt				
4564	30,49	0,5	– 1,8 d	144	130,145,195	unbekannt				
4601	30,70	15,1	– 60,3 b	219		2-methyl-4-phenyl-6-chloro-benzo[3]1,3-diazine		95		oder Isomer, Wiley9
4637	30,90	0,1	– 0,4 d	139	43,55,69	unbekannt				
4664	31,05	0,3	– 1,0 d	43	143,197,235	unbekannt				
4685	31,16	1,1	– 4,4 c	193		5-Acetyl-5H-dibenz[b,f]azepine		82	19209-60-0	Nicht eindeutig, m/z 43 fehlt, aber sicher ein Dibenzazepin, zudem F/RF 70/81%
4744	31,49	0,7	– 2,7 d	43	55,73,193	unbekannt				
4771	31,64	0,2	– 0,9 d	91	43,119,135	unbekannt				
4804	31,82	1,4	– 5,5 d	179	165,178,223	unbekannt				
4841	32,03	0,1	– 0,4 d	180	43,55,69	unbekannt				
4923	32,48	5,7	– 22,8 b	159		Benzene, 1,1'-sulfonylbis[4-chloro-		81	80-07-9	
4957	32,67	0,1	– 0,5 d	180	43,181,209	unbekannt				
4979	32,79	0,1	– 0,3 d	43	93,112,181	unbekannt				
5014	32,99	0,2	– 1,0 d	43	188,201,244	unbekannt				
5045	33,16	0,6	– 2,4 d	234	165,195,249	unbekannt				Ein Dibenzazepin
5079	33,35	1,2	– 4,7 d	43	55,71,194	unbekannt				
5096	33,44	0,1	– 0,6 d	43	69,95,183	unbekannt				
5148	33,73	1,2	– 5,0 d	183	91,150,257	unbekannt				
5170	33,85	0,5	– 2,1 d	150	43,91,257	unbekannt				
5187	33,95	0,3	– 1,3 d	150	43,95,257	unbekannt				
5208	34,06	0,2	– 0,9 d	233	133,205,249	unbekannt				
5231	34,19	0,4	– 1,7 d	227	43,71,183	unbekannt				
5264	34,37	1,0	– 4,0 d	59	55,72,135	unbekannt				

Auftraggeber
Projekt
Auftrag Nr.
Datum

Harress Pickel Consult AG
DU II Kesslergrube, Grenzach Wyhlen
A10-01239
06.10.2010

Anhang: **2**

Probenbezeichnung: KE 20							Int. Probennummer: M1007-05392			
Interne Standards										
Nr.		Name des Internen			Konzentration		Wiederfindung (%)		Bemerkungen	
a		Anilin d5			1,1		21			
b		Nitrobenzol d5			1,1		59			
c		Naphthalin d8			1,1		56			
d		1-Chlorododecan			1,1		116			
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
5290	34,52	0,5	–	2,1 d	147	77,223,224	unbekannt			
5314	34,65	0,7	–	2,9 d	59	43,56,147	unbekannt			
5368	34,95	0,8	–	3,1 d	193	194,239,323	unbekannt			
5462	35,47	0,7	–	2,7 d	135	91,136,178	unbekannt			
5501	35,69	0,1	–	0,4 d	123	43,95,137	unbekannt			
5518	35,78	0,1	–	0,6 d	123	43,95,137	unbekannt			
5616	36,33	0,1	–	0,3 d	192	43,95,220	unbekannt			
5645	36,49	26,4	–	105,6 b	277		Triphenylphosphine oxide	92	791-28-6	
5724	36,92	2,1	–	8,4 b	242		Nordazepam	85	1088-11-5	
5807	37,38	0,7	–	2,7 d	181	183,258,286	unbekannt			
5863	37,69	0,3	–	1,0 d	255	113,226,256	unbekannt			
5887	37,83	0,2	–	0,8 d	236	180,194,222	unbekannt			
6065	38,81	0,1	–	0,5 d	43	55,207,319	unbekannt			
6140	39,23	0,2	–	0,9 d	152	43,55,335	unbekannt			
6306	40,15	0,2	–	0,8 d	69	81,95,137	unbekannt			
6606	41,81	0,2	–	0,7 d	113	44,207,282	unbekannt			
6714	42,41	1,2	–	4,8 d	182	98,140,207	unbekannt			
6750	42,61	1,4	–	5,5 d	140	98,182,321	unbekannt			
6765	42,69	1,3	–	5,2 d	98	140,182,321	unbekannt			

Aufkonzentrierungsfaktor: 1014

Bestimmungsgrenze in µg/l (Naphthalin d8): 0,11

Die Bestimmungsgrenze wurde anhand der von Prof. Dr. M. Oehme zusätzlich identifizierten Substanzen angepasst.

Rot und Kursiv: Kommentare von Prof. Dr. M. Oehme (Institut für Angewandte Analytische Chemie, Niederteufen, Schweiz)

Auftraggeber
Projekt
Auftrag Nr.
Datum

Harress Pickel Consult AG
DU II Kesslergrube, Grenzach Wyhlen
A10-01239
06.10.2010

Anhang: **3**

Probenbezeichnung: Blindprobe 24				Int. Probennummer: M1007-05393					
Interne Standards									
Nr.	Name des Internen	Konzentration		Wiederfindung (%)		Bemerkungen			
a	Anilin d5	1,1		38					
b	Nitrobenzol d5	1,1		68					
c	Naphthalin d8	1,1		71					
d	1-Chlorododecan	1,1		90					
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
3932	26,99	0,08	– 0,3 d	57	73,141,171	unbekannt			Zuckerähnlich, kommt auch in Proben vor, Ursprung unklar
4741	31,47	0,03	– 0,10 d	73	44,57,60	unbekannt			Octadecanoic acid, generelle Kontamination
5736	36,99	0,03	– 0,14 d	59	44,55,72	unbekannt			Ein Alkenylamid, generelle Kontamination

Aufkonzentrierungsfaktor: 1124

Bestimmungsgrenze in µg/l (Naphthalin d8): 0,04

Die Bestimmungsgrenze wurde anhand der von Prof. Dr. M. Oehme zusätzlich identifizierten Substanzen angepasst.

Rot und Kursiv: Kommentare von Prof. Dr. M. Oehme (Institut für Angewandte Analytische Chemie, Niederteufen, Schweiz)

Auftraggeber
Projekt
Auftrag Nr.
Datum

Harress Pickel Consult AG
DU II Kesslergrube, Grenzach Wyhlen
A10-01239
07.10.2010

Anhang: 4

Probenbezeichnung: KE 33				Int. Probennummer:		M1007-05394		
Interne Standards								
Nr.	Name des Internen	Konzentration	Wiederfindung (%)		Bemerkungen			
a	Anilin d5	1,1	32					
b	Nitrobenzol d5	1,1	78					
c	Naphthalin d8	1,1	76					
d	1-Chlorododecan	1,1	97					
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
215	6,39	0,3 – 1,3 b	146		Benzene, 1-chloro-2-methyl-	95	95-49-8	oder Isomer
521	8,08	0,5 – 1,8 b	146		Benzene, 1,3-dichloro-	91	541-73-1	oder Isomer
560	8,30	0,4 – 1,4 b	146		Benzene, 1,4-dichloro-	95	106-46-7	oder Isomer
681	8,97	0,8 – 3,3 b	146		Benzene, 1,4-dichloro-	88	106-46-7	oder Isomer, plus Interferenz m/z 83 etc.
916	10,27	0,6 – 2,3 b	106		o-Aminotoluene	88	95-53-4	oder Isomer
1001	10,74	1,1 – 4,3 d	81	67,79,82	unbekannt			Alkylsubst. Cyclohexen oder Isomer
1164	11,65	2,9 – 11,7 d	99		Triethyl phosphate	94	78-40-0	
1272	12,25	3,1 – 12,3 b	110		Phenol, 2-ethoxy-	92	94-71-3	
1482	13,41	0,8 – 3,0 b	127		p-Chloroaniline	90	106-47-8	oder Isomer
1496	13,49	0,3 – 1,0 b	127		p-Chloroaniline	80	106-47-8	oder Isomer
1711	14,68	0,5 – 2,1 b	117		(+)-2-Phenylbutyronitrile	90	69350-73-8	
1720	14,73	0,5 – 1,9 b	129		2-Ethoxy-4-methylphenol	93	2563-07-7	oder Isomer
1775	15,03	0,3 – 1,3 b	158		4-Chloro-2-methylthiophenol	87	17178-01-7	
1874	15,58	1,1 – 4,5 b	141		Benzenamine, 2-chloro-6-methyl-	84	87-63-8	oder Isomer
1904	15,75	1,5 – 6,1 b	141		Benzenamine, 4-chloro-2-methyl-	85	95-69-2	oder Isomer
2036	16,48	1,1 – 4,3 b	161		Benzenamine, 2,4-dichloro-	89	554-00-7	oder Isomer
2062	16,63	0,2 – 1,0 d	109	43,124,152	unbekannt			
2098	16,38	0,8 – 3,0 d	144	91,116,173	unbekannt			Aromatisch, N-haltig, MW 173
2099	16,83	0,9 – 3,7 d	144	116,117,173	unbekannt			
2306	17,98	2,8 – 11,2 b	135		Phenol, 4-(1,1-dimethylpropyl)-	88	80-46-6	oder Isomer
2334	18,13	0,5 – 1,9 d	124	96,123,180	unbekannt			
2356	18,26	0,5 – 1,8 d	98	43,101,116	unbekannt			
2393	18,46	0,6 – 2,4 d	95	43,99,137	unbekannt			Terpenoid
2426	18,64	2,3 – 9,2 b	161		Benzenamine, 3,5-dichloro-	87	626-43-7	oder Isomer
2583	19,51	0,5 – 2,2 d	91	43,55,57	unbekannt			
2626	19,75	0,3 – 1,2 d	141	95,99,123	unbekannt			
2681	20,06	0,8 – 3,0 d	91	122,138,167,	unbekannt			
2709	20,21	1,7 – 6,6 d	123	92,137,180	unbekannt			Terpenoid
2747	20,42	0,4 – 1,5 d	163	43,95,205	unbekannt			
2772	20,56	0,4 – 1,6 d	126	83,98,141	unbekannt			
2804	20,74	2,8 – 11,0 c	143		1-Naphthalenamine	92	134-32-7	
2842	20,95	1,4 – 5,5 b	111		Benzene, 1-chloro-4-(methylsulfonyl)-	83	98-57-7	
2884	21,18	4,1 – 16,5 b	140		Methypylon	83	125-64-4	
2974	21,68	0,5 – 2,0 d	98	83,153,166	unbekannt			
3008	21,87	1,0 – 3,9 d	169	116,167,168	unbekannt			Teilstruktur Biphenylamin oder Isomer, MW 245
3009	21,87	1,1 – 4,4 d	169	43,116,168	unbekannt			
3040	22,05	1,2 – 4,7 d	151	81,137,208	unbekannt			MW 208, CAS120-25-2 (Ethoxyanisaldehyd) plus Ethylgruppe
3070	22,21	3,7 – 14,9 d	245		(2,2,5,5-Tetramethyl-tetrahydro-1,3,4,6,8-pentaoxa-cyclopenta[a]inden-8a-yl)-methanol	90	NA	
3090	22,32	0,6 – 2,5 b	159		5-Amino-1-phenylpyrazole	83	826-85-7	oder Isomer

Auftraggeber
Projekt
Auftrag Nr.
Datum

Harress Pickel Consult AG
DU II Kesslergrube, Grenzach Wyhlen
A10-01239
07.10.2010

Anhang: **4**

Probenbezeichnung: KE 33					Int. Probennummer: M1007-05394					
Interne Standards										
Nr.	Name des Internen		Konzentration		Wiederfindung (%)		Bemerkungen			
a	Anilin d5		1,1		32					
b	Nitrobenzol d5		1,1		78					
c	Naphthalin d8		1,1		76					
d	1-Chlorododecan		1,1		97					
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
3185	22,85	2,2	–	8,7 d	91	105,147,167	unbekannt			Alkylsubst. Benzol (verzweigte Kette)
3213	23,01	0,2	–	1,0 d	72	43,77,202	unbekannt			
3233	23,12	0,4	–	1,5 d	43	95,99,139	unbekannt			
3279	23,37	4,0	–	15,8 b	91		Benzenesulfonamide, 4-methyl-	89	70-55-3	
3309	23,54	1,6	–	6,2 d	144	103,130,169	unbekannt			
3343	23,73	0,4	–	1,5 d	43		2,2,7,7-Tetramethyl-tetrahydro-bis[1,3]dioxolo[4,5-b;4',5'-d]pyran-3a-carboxylic acid	88	NA	
3384	23,95	0,2	–	1,0 d	99	81,98,137	unbekannt			
3437	24,25	0,8	–	3,4 d	125	43,59,135	unbekannt			
3461	24,38	0,3	–	1,1 d	135	43,114,131	unbekannt			
3523	24,72	0,6	–	2,3 d	43	59,93,259	2,2,5,5-Tetramethyldihydro-1,3,4,6,8-pentaoxacyclopenta[a]indene-3a-carboxylic acid (shu)			
3545	24,85	0,2	–	0,9 d	99	43,119,134	unbekannt			
3572	25,00	0,4	–	1,4 d	91	137,155,212	unbekannt			
3631	25,32	0,7	–	2,9 d	89	43,61,69	unbekannt			
3678	25,58	11,1	–	44,2 d	174	77,173,216	unbekannt			Acetyl an vermutlich Tetrahydronaphthalin + Alkylgruppen
3736	25,90	9,0	–	36,1 d	232		1-phenyl-3-methyl-4-hydroxy-(prop-2-yl)-2,5-dihydropyrazole-5-one	93		Wiley9
3765	26,07	0,5	–	2,0 d	137	173,201,246	unbekannt			
3781	26,15	0,7	–	3,0 d	216	115,128,129	unbekannt			
3806	26,29	0,4	–	1,5 d	91	81,129,171	unbekannt			
3822	26,38	0,2	–	0,9 d	123	43,91,95	unbekannt			
3855	26,56	0,9	–	3,4 d	136	154,182,183	unbekannt			
3890	26,76	0,2	–	0,9 d	43	91,135,148	unbekannt			
3913	26,89	2,8	–	11,2 b	189		Glutethimide	82	77-21-4	
3960	27,15	2,0	–	8,0 b	188		Antipyrine	81	60-80-0	
4047	27,63	6,5	–	25,9 d	202	56,77,110	unbekannt			Sehr wenig Information im MS. besteht aus Phenyl + Teilstr. 110 u + Rest 15 u. Aromatisch. Geradz. Anz. N. A
4133	28,10	0,8	–	3,2 b	231		Aminopyrine	83	58-15-1	
4195	28,45	15,0	–	59,8 b	215		Propyphenazone	93	479-92-5	
4275	28,89	1,0	–	4,0 d	183	97,155,184	unbekannt			
4308	29,08	0,7	–	3,0 d	183	97,155,184	unbekannt			
4358	29,35	0,5	–	2,2 d	64		Cyclic octaatomic sulfur	87	10544-50-0	
4378	29,46	0,2	–	0,8 d	148	43,135,192	unbekannt			
4420	29,70	0,3	–	1,1 d	187	77,107,189	unbekannt			
4452	29,87	3,9	–	15,5 b	169		a,a-Bis(2-cyanoethyl)benzyl cyanide	76		Oder Isomer, Wiley9

Auftraggeber
Projekt
Auftrag Nr.
Datum

Harress Pickel Consult AG
DU II Kesslergrube, Grenzach Wyhlen
A10-01239
07.10.2010

Anhang: **4**

Probenbezeichnung: KE 33				Int. Probennummer:		M1007-05394		
Interne Standards								
Nr.	Name des Internen	Konzentration	Wiederfindung (%)		Bemerkungen			
a	Anilin d5	1,1	32					
b	Nitrobenzol d5	1,1	78					
c	Naphthalin d8	1,1	76					
d	1-Chlorododecan	1,1	97					
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
4477	30,01	1,5 – 6,1 b	230		Benz[c]isoxazole, 1,3-dihydro-5-chloro-3-phenyl-	87	NA	Nicht eindeutig, evtl. 2-amino-5-chlorophenyl) phenyl-methanone
4499	30,13	0,3 – 1,1 d	181	152,165,210	unbekannt			
4562	30,48	1,2 – 4,8 d	221	141,144,195	unbekannt			
4599	30,69	0,4 – 1,5 d	219	253,254,255	unbekannt			
4663	31,04	0,4 – 1,4 d	197	43,91,143	unbekannt			
4677	31,12	0,2 – 1,0 d	142	43,55,169	unbekannt			
4694	31,21	0,8 – 3,1 d	144	103,130,145	unbekannt			
4742	31,48	0,3 – 1,0 d	193	43,55,73	unbekannt			
4869	32,18	0,2 – 0,8 d	249	93,137,193	unbekannt			
4889	32,30	1,2 – 4,6 d	137	144,165,193	unbekannt			
4924	32,49	4,4 – 17,5 b	159		Benzene, 1,1'-sulfonylbis[4-chloro-	86	80-07-9	
5016	33,00	0,3 – 1,1 d	43	71,167,169	unbekannt			
5079	33,35	0,3 – 1,1 d	43	71,91,194	unbekannt			
5180	33,91	0,7 – 2,7 d	136	122,150,236	unbekannt			
5343	34,81	0,3 – 1,1 d	129	57,70,71	unbekannt			
5368	34,95	0,7 – 2,9 d	193	194,239,323	unbekannt			
5459	35,45	0,5 – 2,0 d	135	91,136,178	unbekannt			
5644	36,48	2,0 – 8,0 b	277		Triphenylphosphine oxide	91	791-28-6	
5721	36,90	0,2 – 0,9 b	242		2H-1,4-Benzodiazepin-2-one, 8-chloro-1,3-dihydro-5-phenyl-	80	5571-46-0	Wiley9
5801	37,35	0,4 – 1,4 c	286		[1,1'-Binaphthalene]-2,2'-diol	84	602-09-5	
5970	38,29	0,1 – 0,4 b	113	43,131,243	unbekannt			Zuckerähnlich
6088	38,94	0,3 – 1,2 d	113	43,101,243	unbekannt			
6132	39,19	0,4 – 1,4 d	113	43,101,243	unbekannt			
6450	40,95	0,8 – 3,2 d	98	43,57,71	unbekannt			
6769	42,72	0,7 – 3,0 d	182	55,98,140	unbekannt			
6803	42,90	0,2 – 0,9 d	98	182,207,321	unbekannt			
6832	43,07	0,4 – 1,4 d	57	43,71,85	unbekannt			

Aufkonzentrierungsfaktor: 1150

Bestimmungsgrenze in µg/l (Naphthalin d8): 0,14

Die Bestimmungsgrenze wurde anhand der von Prof. Dr. M. Oehme zusätzlich identifizierten Substanzen angepasst.

Rot und Kursiv: Kommentare von Prof. Dr. M. Oehme (Institut für Angewandte Analytische Chemie, Niederteufen, Schweiz)

Auftraggeber
Projekt
Auftrag Nr.
Datum

Harress Pickel Consult AG
DU II Kesslergrube, Grenzach Wyhlen
A10-01239
07.10.2010

Anhang: **5**

Probenbezeichnung: KE 32					Int. Probennummer:		M1007-05395		
Interne Standards									
Nr.	Name des Internen		Konzentration		Wiederfindung (%)		Bemerkungen		
a	Anilin d5		1,1		39				
b	Nitrobenzol d5		1,1		98				
c	Naphthalin d8		1,1		97				
d	1-Chlorododecan		1,1		102				
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
524	8,10	0,1	– 0,4	b	146	Benzene, 1,4-dichloro-	81	95-50-1	oder Isomer
561	8,31	0,2	– 0,7	b	146	Benzene, 1,4-dichloro-	88	106-46-7	oder Isomer
685	8,99	0,3	– 1,3	d	83	43,56,141 unbekannt			
758	9,40	0,1	– 0,3	d	83	41,55,57 unbekannt			Mit Kette substituiertes Cyclohexan
1004	10,76	1,0	– 4,0	d	81	67,79,82 unbekannt			Hinweis auf alkylsubstituiertes Cyclohexen oder Isomer
1275	12,26	0,6	– 2,6	b	110	Phenol, 2-ethoxy-	90	94-71-3	
1724	14,75	0,1	– 0,3	d	124	78,123,152 unbekannt			
1876	15,59	0,3	– 1,2	b	141	Benzenamine, 3-chloro-2-methyl-	86	87-60-5	oder Isomer
1907	15,77	0,3	– 1,1	b	141	Benzenamine, 2-chloro-4-methyl-	84	615-65-6	oder Isomer
1961	16,07	0,1	– 0,5	d	43	85,99,127 unbekannt			
2039	16,50	0,2	– 0,6	b	161	Benzenamine, 2,5-dichloro-	90	95-82-9	oder Isomer
2104	16,86	0,2	– 0,9	d	144	106,134,173 unbekannt			
2306	17,98	1,4	– 5,5	b	135	Phenol, 4-(1,1-dimethylpropyl)-	91	80-46-6	
2364	18,30	0,1	– 0,4	d	160	108,132,175 unbekannt			
2395	18,47	0,3	– 1,3	d	95	43,109,151 unbekannt			Terpenoid
2680	20,05	0,4	– 1,5	d	91	122,138,173 unbekannt			
2711	20,22	0,1	– 0,3	d	92	107,121,122 unbekannt			
2744	20,41	0,1	– 0,3	d	191	57,205,206 unbekannt			
2805	20,74	0,1	– 0,4	c	143	2-Naphthalenamine	88	91-59-8	
2842	20,95	0,6	– 2,4	b	111	Benzene, 1-chloro-4-(methylsulfonyl)-	84	98-57-7	
2948	21,54	0,0	– 0,2	d	110	111,138,183 unbekannt			
3009	21,87	0,5	– 1,8	d	169	116,167,168 unbekannt			Teilstruktur Biphenylamin oder Isomer, MW 245
3044	22,07	0,1	– 0,5	d	136	134,152,181 unbekannt			
3069	22,21	4,4	– 17,7	d	245	(2,2,5,5-Tetramethyl-tetrahydro-1,3,4,6,8-pentaoxa-cyclopenta[a]inden-8a-yl)-methanol	92	NA	
3181	22,83	1,5	– 6,0	b	91	Benzene, (1,1-diethylpropyl)-	82	4170-84-7	oder Isomer
3263	23,28	0,3	– 1,2	b	91	Benzenesulfonamide, 4-methyl-	85	70-55-3	oder Isomer
3263	23,28	0,2	– 0,9	d	91	65,155,171 unbekannt			
3308	23,53	0,2	– 0,8	d	144	103,130,169 unbekannt			
3342	23,72	0,1	– 0,3	d	43	2,2,7,7-Tetramethyl-tetrahydro-bis[1,3]dioxolo[4,5-b;4',5'-d]pyran-3a-carboxylic acid	81	NA	
3434	24,23	0,3	– 1,0	d	59	43,99,131 unbekannt			Zuckerähnlich
3459	24,37	0,0	– 0,2	d	131	43,73,114 unbekannt			
3482	24,50	0,2	– 0,9	d	123	94,122,134 unbekannt			Substituiertes Aminophenol
3506	24,63	0,4	– 1,6	d	123	94,122,134 unbekannt			Substituiertes Aminophenol
3522	24,72	0,1	– 0,6	d	43	2,2,5,5-Tetramethyldihydro-1,3,4,6,8-pentaoxacyclopenta[a]indene-3a-carboxylic acid	79	NA	
3543	24,83	0,0	– 0,1	d	134	43,138,223 unbekannt			
3574	25,01	0,1	– 0,2	d	150	91,155,195 unbekannt			

Auftraggeber
Projekt
Auftrag Nr.
Datum

Harress Pickel Consult AG
DU II Kesslergrube, Grenzach Wyhlen
A10-01239
07.10.2010

Anhang: **5**

Probenbezeichnung: KE 32						Int. Probennummer:		M1007-05395		
Interne Standards										
Nr.	Name des Internen		Konzentration		Wiederfindung (%)		Bemerkungen			
a	Anilin d5		1,1		39					
b	Nitrobenzol d5		1,1		98					
c	Naphthalin d8		1,1		97					
d	1-Chlorododecan		1,1		102					
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
3606	25,18	0,4	–	1,6	d	150	67,149,195	unbekannt		
3651	25,43	0,4	–	1,6	d	43	59,97,109	unbekannt		
3674	25,56	0,2	–	1,0	d	174	77,105,216	unbekannt		Acetyl an vermutlich Tetrahydronaphthalin + Alkylgruppen
3723	25,83	1,0	–	3,8	b	232	1-phenyl-3-methyl-4-hydroxy-(prop-2-yl)-2,5-dihydropyrazole-5-one	87		Wiley9
3763	26,05	0,2	–	0,8	d	246	173,201,217	unbekannt		
3803	26,28	0,1	–	0,4	d	94	106,123,152	unbekannt		
3840	26,48	0,3	–	1,1	d	136	154,182,183	unbekannt		
3875	26,68	0,1	–	0,4	d	221	43,119,161	unbekannt		
3909	26,86	0,9	–	3,5	b	189	Glutethimide	86	77-21-4	
3949	27,09	0,7	–	3,0	b	188	Antipyrine	88	60-80-0	
4018	27,47	0,1	–	0,5	d	205	90,114,126	unbekannt		
4038	27,58	3,6	–	14,4	d	202	56,77,110	unbekannt		Sehr wenig Information im MS. besteht aus Phenyl + Teilstr. 110 u + Rest 15 u. Aromatisch. Geradz. Anz. N. A
4102	27,93	0,1	–	0,3	d	217	189,216,290	unbekannt		
4116	28,01	0,0	–	0,2	d	162	44,147,161	unbekannt		
4140	28,14	0,0	–	0,2	d	226	170,185,241	unbekannt		
4171	28,32	0,1	–	0,5	d	142	90,190,205	unbekannt		
4188	28,41	1,2	–	5,0	b	215	Propyphenazone	88	479-92-5	
4325	29,17	0,2	–	0,8	d	235	96,109,281	unbekannt		
4441	29,81	0,5	–	2,0	b	169	a,a -Bis(2-cyanoethyl)benzyl cyanide	74		Oder Isomer, Wiley9
4475	30,00	0,3	–	1,1	d	230	77,231,232	unbekannt		
4501	30,14	0,1	–	0,3	d	59	43,71,97	unbekannt		
4687	31,18	0,1	–	0,3	d	144	44,103,130	unbekannt		
4722	31,37	0,2	–	0,7	b	168	2-Aminodiphenylsulfone	85	4273-98-7	
4740	31,47	0,2	–	0,7	d	73	43,57,60	unbekannt		
4766	31,61	0,1	–	0,4	d	91	44,119,135	unbekannt		
4785	31,72	0,0	–	0,2	d	59	43,44,72	unbekannt		
4817	31,90	0,1	–	0,3	d	204	231,232,274	unbekannt		
4843	32,04	1,3	–	5,1	d	137	165,166,193	unbekannt		
4921	32,47	0,5	–	1,9	b	159	Benzene, 1,1'-sulfonylbis[4-chloro-	86	80-07-9	
4978	32,79	0,4	–	1,5	d	112	70,92,93	unbekannt		Ein aromatisches Sulfonamid
5143	33,70	1,0	–	4,1	d	136	122,236,281	unbekannt		
5305	34,60	0,2	–	0,9	d	59	135,207,209	unbekannt		
5363	34,92	0,5	–	2,2	d	193	194,239,323	unbekannt		
5404	35,15	0,8	–	3,2	d	178	160,164,206	unbekannt		
5581	36,13	0,1	–	0,2	d	57	43,44,71	unbekannt		
5632	36,41	0,2	–	0,9	b	277	Triphenylphosphine oxide	85	791-28-6	
5861	37,68	0,1	–	0,5	d	255	128,226,256	unbekannt		
5977	38,33	0,1	–	0,3	d	44	227,241,242	unbekannt		
6003	38,47	0,1	–	0,3	d	113	43,44,59	unbekannt		

Auftraggeber
Projekt
Auftrag Nr.
Datum

Harress Pickel Consult AG
DU II Kesslergrube, Grenzach Wyhlen
A10-01239
07.10.2010

Anhang: **5**

Probenbezeichnung: **KE 32** Int. Probennummer: **M1007-05395**

Interne Standards

Nr.	Name des Internen	Konzentration	Wiederfindung (%)	Bemerkungen
a	Anilin d5	1,1	39	
b	Nitrobenzol d5	1,1	98	
c	Naphthalin d8	1,1	97	
d	1-Chlorododecan	1,1	102	

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
6087	38,94	0,3 – 1,2 d	113	43,101,243	unbekannt		
6131	39,18	0,3 – 1,0 d	113	43,101,243	unbekannt		
6150	39,28	0,1 – 0,3 d	238	44,164,193	unbekannt		
6177	39,43	0,1 – 0,4 d	113	43,44,59	unbekannt		
6305	40,14	0,1 – 0,3 d	69	44,81,207	unbekannt		
6326	40,26	0,1 – 0,3 d	336	44,207,306	unbekannt		
6605	41,81	0,3 – 1,2 d	317	197,207,300	unbekannt		
6850	43,17	0,1 – 0,6 d	207	281,311,312	unbekannt		

Aufkonzentrierungsfaktor: 729

Bestimmungsgrenze in µg/l (Naphthalin d8): 0,06

Die Bestimmungsgrenze wurde anhand der von Prof. Dr. M. Oehme zusätzlich identifizierten Substanzen angepasst.

Rot und Kursiv: Kommentare von Prof. Dr. M. Oehme (Institut für Angewandte Analytische Chemie, Niederteufen, Schweiz)

Auftraggeber
Projekt
Auftrag Nr.
Datum

Harress Pickel Consult AG
DU II Kesslergrube, Grenzach Wyhlen
A10-01239
06.10.2010

Anhang: **6**

Probenbezeichnung: Blindprobe 23				Int. Probennummer: M1007-05396			
Interne Standards							
Nr.	Name des Internen	Konzentration	Wiederfindung (%)		Bemerkungen		
a	Anilin d5	1,2	33				
b	Nitrobenzol d5	1,2	61				
c	Naphthalin d8	1,2	68				
d	1-Chlorododecan	1,2	87				
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
3931	26,99	0,12 – 0,5 d	57	71,73,141	unbekannt		<i>Zuckerähnlich, kommt auch in Proben vor, Ursprung unklar</i>
4184	28,39	0,07 – 0,3 d	73	n-Hexadecanoic acid	81	57-10-3	<i>generelle Kontamination</i>
4741	31,48	0,03 – 0,1 d	73	<i>Octadecanoic acid</i>	75	57-11-4	<i>generelle Kontamination</i>
5344	34,82	0,37 – 1,5 d	129	Hexanedioic acid, bis(2-ethylhexyl) ester	87	103-23-1	<i>generelle Kontamination</i>

Aufkonzentrierungsfaktor: 1060

Bestimmungsgrenze in µg/l (Naphthalin d8): 0,05

Die Bestimmungsgrenze wurde anhand der von Prof. Dr. M. Oehme zusätzlich identifizierten Substanzen angepasst.

Rot und Kursiv: Kommentare von Prof. Dr. M. Oehme (Institut für Angewandte Analytische Chemie, Niederteufen, Schweiz)

Auftraggeber
Projekt
Auftrag Nr.
Datum

Harress Pickel Consult AG
DU II Kesslergrube, Grenzach Wyhlen
A10-01239
07.10.2010

Anhang: **7**

Probenbezeichnung: KE 36										Int. Probennummer:		M1007-05397	
Interne Standards													
Nr.		Name des Internen				Konzentration		Wiederfindung (%)		Bemerkungen			
a		Anilin d5				1,2		31					
b		Nitrobenzol d5				1,2		63					
c		Naphthalin d8				1,2		67					
d		1-Chlorododecan				1,2		71					
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	
1006	10,77	0,5	–	1,9	d	81	54,67,82		unbekannt			Alkylsubst. Cyclohexen oder Isomer	
1279	12,29	0,1	–	0,4	b	110			Phenol, 2-ethoxy-	86	94-71-3		
2109	16,89	0,02	–	0,1	d	134	106,133,179		unbekannt			Teilstruktur Pyridin plus Acetatgruppe	
2398	18,49	0,1	–	0,4	d	95	43,99,137		unbekannt				
2685	20,08	0,06	–	0,2	d	91	138,167,173		unbekannt				
2852	21,01	0,6	–	2,3	d	154	58,140,170		unbekannt				
3013	21,90	0,06	–	0,3	d	116	43,169,245		unbekannt				
3072	22,23	0,3	–	1,1	d	43			(2,2,5,5-Tetramethyl-tetrahydro-1,3,4,6,8-pentaoxa-cyclopenta[ajinden-8a-yl)-methanol	85	NA		
3184	22,85	0,2	–	0,7	b	91			Benzene, (1,1-diethylpropyl)-	77	4170-84-7	Alkylsubst. Benzol (verzweigte Kette)	
3197	22,92	0,1	–	0,4	d	125	89,141,204		unbekannt				
3266	23,30	0,04	–	0,2	d	91	65,165,171		unbekannt				
3312	23,56	0,04	–	0,1	d	144	130,169,198		unbekannt				
3364	23,84	0,0	–	0,2	d	207	41,208,235		unbekannt				
3576	25,02	0,08	–	0,3	d	150	91,155,195		unbekannt				
3625	25,29	0,09	–	0,3	d	137	43,165,208		unbekannt				
3653	25,45	0,1	–	0,4	d	43	59,97,109		unbekannt				
3724	25,84	0,5	–	2,2	b	232			1-phenyl-3-methyl-4-hydroxy-(prop-2-yl)-2,5-dihydropyrazole-5-one	90		Wiley9	
3764	26,06	0,2	–	0,8	d	246	137,173,201		unbekannt				
3839	26,48	0,03	–	0,1	d	182	136,154,183		unbekannt				
4039	27,59	0,4	–	1,4	d	202	56,77,110		unbekannt				
4190	28,42	0,8	–	3,0	b	215			Propyphenazone	89	479-92-5		
4353	29,33	0,08	–	0,3	d	148	119,135,192		unbekannt				
4443	29,83	0,2	–	1,0	d	169	129,142,223		unbekannt				
4742	31,48	0,07	–	0,3	d	60	43,57,73		unbekannt				
4769	31,63	0,04	–	0,2	d	91	44,135,241		unbekannt				
4785	31,72	0,05	–	0,2	d	59	43,44,72		unbekannt				
4841	32,03	0,3	–	1,2	d	165	137,166,193		unbekannt				
4871	32,20	0,04	–	0,1	d	43	97,137,165		unbekannt				
5101	33,47	0,13	–	0,5	d	57	43,71,85		unbekannt				
5141	33,69	0,07	–	0,3	d	136	122,236,281		unbekannt				
5311	34,64	0,10	–	0,4	d	59	43,44,72		unbekannt				
5365	34,94	0,3	–	1,2	d	193	194,239,323		unbekannt				
5516	35,77	0,1	–	0,4	d	301	105,223,316		unbekannt				
5565	36,04	0,03	–	0,1	d	301	44,223,316		unbekannt				
5863	37,70	0,1	–	0,6	d	255	128,226,256		unbekannt				
6074	38,87	0,04	–	0,2	d	320	44,180,207		unbekannt				
6596	41,76	0,4	–	1,7	d	317	197,273,300		unbekannt				

Aufkonzentrierungsfaktor: 1006
Bestimmungsgrenze in µg/l (Naphthalin d8): 0,025

Auftraggeber
Projekt
Auftrag Nr.
Datum

Harress Pickel Consult AG
DU II Kesslergrube, Grenzach Wyhlen
A10-01239
07.10.2010

Anhang: **7**

Probenbezeichnung: KE 36				Int. Probennummer:		M1007-05397	
Interne Standards							
Nr.	Name des Internen	Konzentration	Wiederfindung (%)		Bemerkungen		
a	Anilin d5	1,2	31				
b	Nitrobenzol d5	1,2	63				
c	Naphthalin d8	1,2	67				
d	1-Chlorododecan	1,2	71				
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

Die Bestimmungsgrenze wurde anhand der von Prof. Dr. M. Oehme zusätzlich identifizierten Substanzen angepasst.

Rot und Kursiv: Kommentare von Prof. Dr. M. Oehme (Institut für Angewandte Analytische Chemie, Niederteufen, Schweiz)

Labors: Analytik, Ökotoxikologie,
Verfahrenstechnik

ANALYSEN-BERICHT

HPC Harress Pickel Consult AG
Martin Steckermeier
Nansenstrasse 5
79539 Lörrach

Schlieren, 14. Oktober 2010

Projekt: DU II "Kesslergrube", Grenzach-Wyhlen
BMG Auftragsnummer: A10-01340
Datum Auftrag: 19. Juli 2010
Datum Analysen: 19. Juli - 26. August 2010

Probenliste & Untersuchungsauftrag

Anzahl Proben 7

Parameter	Anz.	Bestimmungsmethode	BMG SAA-Nr
Screening organische Substanzen	7	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/ZürichTel. 044 732 92 92 • Fax 044 732 92 21
labors@bmgeg.ch
www.bmgeg.ch

Seite 1 von 3

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
A10-01340
14.10.2010

Probenbezeichnung	KE 28	P 3	KE 30	KE 31		
Tiefe						
Datum Probenahme	18.07.2010	18.07.2010	18.07.2010	18.07.2010		
Interne Probenbezeichnung	M1007-05742	M1007-05743	M1007-05744	M1007-05745		
Datum Probeneingang	19.07.2010	19.07.2010	19.07.2010	19.07.2010		
Probenart	Wasser	Wasser	Wasser	Wasser		
Organische Summenparameter						
Screening organische Substanzen	siehe Anhang 1	siehe Anhang 2	siehe Anhang 3	siehe Anhang 4		

Probenbezeichnung	KE 23a	Blindprobe 16.07	Blindprobe 18.07			
Tiefe						
Datum Probenahme	16.07.2010	16.07.2010	18.07.2010			
Interne Probenbezeichnung	M1007-05746	M1007-05747	M1007-05748			
Datum Probeneingang	16.07.2010	16.07.2010	19.07.2010			
Probenart	Wasser	Wasser	Wasser			
Organische Summenparameter						
Screening organische Substanzen	siehe Anhang 5	siehe Anhang 6	siehe Anhang 7			

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	<div> Gaschromatograph: Säule: Injektion: Temperaturprogramm: Massenselektiver Detektor: Ionisierung: Massen: Scangeschwindigkeit Bibliothek: </div> <div> Finnigan: Trace Ultra DB5ms, 30m x 0.25 mm, 0.25 µm 2 µl; Splitless 40°C, 2 Min.; 6°C/Min bis 280°C; 10°C bis 300°C; 6 Min. Single Quadrupole EI; 70 eV 33 - 500 m/z 3 Scans/Sek. NIST 08 </div>

Generelle Bemerkungen zu den Screenings

Alle Identifikationen sind tentativ, solange diese nicht mit Referenzverbindungen bestätigt worden sind.

% 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

Harress Pickel Consult AG
DU II Kesslergrube, Grenzach Wyhlen
A10-01340
27.09.2010

Anhang: **1**

Probenbezeichnung: KE 28						Int. Probennummer:		M1007-05742		
Interne Standards										
Nr.		Name des Internen		Konzentration		Wiederfindung (%)		Bemerkungen		
a		Anilin d5		34		47				
b		Nitrobenzol d5		34		99				
c		Naphthalin d8		34		85				
d		1-Chlorododecan		34		97				
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
370	7,25	147	–	586 a	93		Aniline	94	62-53-3	
996	10,71	168	–	673 d	81	54,67,82	unbekannt			Hiwneis auf alkylsubstituiertes Cyclohexen oder Isomer
1279	12,25	2	–	6 b	110		Phenol, 2-ethoxy	80	94-71-3	
1470	13,34	20	–	82 b	121		Benzenamine, 3,4-dimethyl-	94	95-64-7	oder Isomer
2096	16,81	46	–	185 d	134	106,133,179	unbekannt			Teilstruktur Pyridin plus Acetatgruppe
2310	18,00	44	–	174 b	109		Ethyl 4-methyl-5-imidazolecarboxylate	85	51605-32-4	
2387	18,42	10	–	42 d	182	109,137,153	unbekannt			
2681	20,05	77	–	308 d	138		3-Ethoxycarbonyl-2,5-dimethylpyrrole	83		Wiley9
2967	21,64	33	–	133 d	110	42,138,183	unbekannt			
3008	21,86	14	–	57 d	43	69,169,245	unbekannt			
3078	22,25	728	–	2912 d	43		(2,2,5,5-Tetramethyl-tetrahydro-1,3,4,6,8-pentaoxa-cyclopenta[a]inden-8a-yl)-methanol	93	NA	
3185	22,84	8	–	33 d	139	43,96,109	unbekannt			
3355	23,79	13	–	51 d	137	108,110,136	unbekannt			
3431	24,21	7	–	28 d	59	43,71,131	unbekannt			
3541	24,82	12	–	46 d	134	138,166,223	unbekannt			
3608	25,19	8	–	31 d	64	43,96,160	unbekannt			
3647	25,40	12	–	47 d	43	64,109,150	unbekannt			
3667	25,52	8	–	31 d	150	64,134,195	unbekannt			
3682	25,60	11	–	42 d	150	64,149,195	unbekannt			
3709	25,75	10	–	40 d	150	67,149,195	unbekannt			
3761	26,04	19	–	77 d	246	173,201,217	unbekannt			
3852	26,54	114	–	457 d	136	154,182,183	unbekannt			
3874	26,66	14	–	57 d	221	43,119,161	unbekannt			
4101	27,92	7	–	28 d	217	64,216,290	unbekannt			
4220	28,58	377	–	1507 d	193	165,166,194	unbekannt			Hinweis auf N-aromatische Verbindung
4327	29,17	37	–	149 d	235	64,96,281	unbekannt			
4365	29,38	286	–	1144 d	64		Cyclic octaatomic sulfur	89	10544-50-0	
4456	29,89	33	–	131 d	232	160,173,201	unbekannt			
4503	30,15	7	–	30 d	59	43,71,97	unbekannt			
4731	31,41	9	–	38 d	193	194,206,239	unbekannt			
4828	31,95	83	–	333 d	206	178,249,250	unbekannt			
4899	32,34	13	–	51 d	137	165,166,193	unbekannt			
5136	33,66	114	–	456 d	190	162,191,236	unbekannt			
5159	33,78	105	–	420 d	136	122,236,281	unbekannt			
5259	34,34	18	–	71 d	342	43,59,223	unbekannt			
5313	34,64	19	–	75 d	135	207,209,253	unbekannt			
5341	34,79	16	–	64 d	129		Hexanedioic acid, bis(2-ethylhexyl) ester	86	103-23-1	
5364	34,92	40	–	162 d	193	194,239,323	unbekannt			
5581	36,12	11	–	44 d	278	57,164,204	unbekannt			
5968	38,27	10	–	40 d	113	43,59,243	unbekannt			

Auftraggeber
Projekt
Auftrag Nr.
Datum

Harress Pickel Consult AG
DU II Kesslergrube, Grenzach Wyhlen
A10-01340
27.09.2010

Anhang: **1**

Probenbezeichnung: KE 28				Int. Probennummer: M1007-05742					
Interne Standards									
Nr.	Name des Internen	Konzentration		Wiederfindung (%)		Bemerkungen			
a	Anilin d5	34		47					
b	Nitrobenzol d5	34		99					
c	Naphthalin d8	34		85					
d	1-Chlorododecan	34		97					
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
6086	38,92	43	– 173 d	113	43,101,243	unbekannt			Hinweis auf zuckerähnliche Verbindung
6129	39,16	29	– 117 d	11	43,101,243	unbekannt			Hinweis auf zuckerähnliche Verbindung
6161	39,34	16	– 63 d	238	164,193,294	unbekannt			
6211	39,61	13	– 51 d	238	164,193,294	unbekannt			
6452	40,95	10	– 41 d	43	57,71,215	unbekannt			

Aufkonzentrierungsfaktor:

24

Bestimmungsgrenze in µg/l (Naphthalin d8):

2,45

Die Bestimmungsgrenze wurde anhand der von Prof. Dr. M. Oehme zusätzlich identifizierten Substanzen angepasst.

Rot und Kursiv: Kommentare von Prof. Dr. M. Oehme (Institut für Angewandte Analytische Chemie, Niederteufen, Schweiz)

Auftraggeber
Projekt
Auftrag Nr.
Datum

Harress Pickel Consult AG
DU II Kesslergrube, Grenzach Wyhlen
A10-01340
30.09.2010

Anhang: **2**

Probenbezeichnung: P 3										Int. Probennummer:		M1007-05743	
Interne Standards													
Nr.		Name des Internen				Konzentration		Wiederfindung (%)		Bemerkungen			
a		Anilin d5				14		38					
b		Nitrobenzol d5				14		93					
c		Naphthalin d8				14		86					
d		1-Chlorododecan				14		99					
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	
679	8,96	3	–	12	d	83	43,56,141	unbekannt					
997	10,72	29	–	118	d	81	54,67,82	unbekannt				Hinweis auf alkylsubstituiertes Cyclohexen oder Isomer	
1273	12,25	6	–	23	b	110		Phenol, 2-ethoxy-		90	94-71-3		
1475	13,37	2	–	6	b	121		Benzenamine, 3,4-dimethyl-		86	95-64-1		
1724	14,75	0	–	2	b	124		2-Methoxy-4-phenol		80	2563-07-7		
1846	15,42	3	–	11	b	135		Benzenamine, 2,4,6-trimethyl-		85	88-05-1	oder Isomer	
2104	16,85	1	–	5	d	134	106,133,179	unbekannt				Teilstruktur Pyridin plus Acetatgruppe	
2307	17,98	7	–	27	b	135		Phenol, 4-(1,1-dimethylpropyl)-		84	80-46-6		
2395	18,47	2	–	6	d	95	43,49,137	unbekannt					
2683	20,06	42	–	166	b	138		3-Ethoxycarbonyl-2,5-dimethylpyrrole		84		Wiley9	
2805	20,73	1	–	4	c	143		1-Naphthylamine		84	134-32-7		
2958	21,59	6	–	23	d	110	111,138,183	unbekannt					
3010	21,88	3	–	13	d	169	43,168,245	unbekannt					
3075	22,24	187	–	747	d	43		(2,2,5,5-Tetramethyl-tetrahydro-1,3,4,6,8-pentaoxa-cyclopenta[a]inden-8a-yl)-methanol		93	NA		
3183	22,83	1	–	5	d	91		Benzene, (1,1-diethylpropyl)-		78	4170-84-7	oder anderes alkylsubstituiertes Benzol (Kette verzweigt)	
3341	23,71	2	–	7	d	43		2,2,7,7-Tetramethyl-tetrahydro-bis[1,3]dioxolo[4,5-b;4',5'-d]pyran-3a-carboxylic acid		91	NA		
3433	24,21	3	–	10	d	49	43,73,113,131	unbekannt				Hinweis auf zuckerähnliche Verbindung	
3522	24,71	4	–	15	d	43		2,2,5,5-Tetramethyldihydro-1,3,4,6,8-pentaoxacyclopenta[a]indene-3a-carboxylic acid		84	NA		
3543	24,83	5	–	22	d	134	108,138,223	unbekannt					
3651	25,43	9	–	35	d	43	109,150,195	unbekannt					
3724	25,83	2	–	9	d	43	59,93,232	unbekannt					
3763	26,05	3	–	14	d	246	66,173,201	unbekannt					
3847	26,51	19	–	78	d	136	154,182,183	unbekannt					
3911	26,87	3	–	11	d	149	117,132,189	unbekannt					
3953	27,10	3	–	11	b	188		Antipyrine		82	60-80-0		
4039	27,58	7	–	30	d	202	56,77,110	unbekannt				Sehr wenig Information im MS. besteht aus Phenyl + Teilstr. 110 u + Rest 15 u. Aromatisch. Geradz. Anz. N. A	
4189	28,41	9	–	36	b	215		Propylphenazone		78	479-92-5		
4325	29,16	7	–	28	d	235	96,109,281	unbekannt					
4358	29,34	4	–	14	d	64		Cyclic octaatomic sulfur		90	10544-50-0		
4461	29,92	2	–	10	d	43	99,113,171	unbekannt					

Auftraggeber
Projekt
Auftrag Nr.
Datum

Harress Pickel Consult AG
DU II Kesslergrube, Grenzach Wyhlen
A10-01340
30.09.2010

Anhang: **2**

Probenbezeichnung: P 3						Int. Probennummer: M1007-05743					
Interne Standards											
Nr.		Name des Internen				Konzentration		Wiederfindung (%)		Bemerkungen	
a		Anilin d5				14		38			
b		Nitrobenzol d5				14		93			
c		Naphthalin d8				14		86			
d		1-Chlorododecan				14		99			
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
4513	30,20	3	–	12	d	140	141,186,214	unbekannt			
4808	31,84	2	–	7	d	56		Hexanoic acid, butylester	86		
5024	33,04	8	–	34	d	137	165,166,193	unbekannt			
5149	33,73	21	–	85	d	136	122,236,281	unbekannt			
5365	34,93	7	–	30	d	193	194,239,323	unbekannt			
5430	35,29	12	–	50	d	178	160,164,206	unbekannt			
5970	38,28	4	–	16	d	113	43,59,243	unbekannt			
6088	38,93	11	–	46	d	113	43,101,243	unbekannt			Hinweis auf zuckerähnliche Verbindung
6131	39,17	9	–	36	d	113	43,101,243	unbekannt			Hinweis auf zuckerähnliche Verbindung
6151	39,28	3	–	11	d	238	164,193,294	unbekannt			

Aufkonzentrierungsfaktor:

60

Bestimmungsgrenze in µg/l (Naphthalin d8):

0,68

Die Bestimmungsgrenze wurde anhand der von Prof. Dr. M. Oehme zusätzlich identifizierten Substanzen angepasst.

Rot und Kursiv: Kommentare von Prof. Dr. M. Oehme (Institut für Angewandte Analytische Chemie, Niederteufen, Schweiz)

Auftraggeber
Projekt
Auftrag Nr.
Datum

Harress Pickel Consult AG
DU II Kesslergrube, Grenzach Wyhlen
A10-01340
27.09.2010

Anhang: **3**

Probenbezeichnung: KE 30				Int. Probennummer: M1007-05744						
Interne Standards										
Nr.	Name des Internen		Konzentration	Wiederfindung (%)		Bemerkungen				
a	Anilin d5		1,1	29						
b	Nitrobenzol d5		1,1	85						
c	Naphthalin d8		1,1	82						
d	1-Chlorododecan		1,1	89						
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	
205	6,33	0,3	– 1,1	b	91		Benzene, 1-chloro-2-methyl	93	95-49-8	*
564	8,32	0,5	– 1,9	d	99	41,43,71	unbekannt			
670	8,90	2,3	– 9,1	b	146		Benzene, 1,2-dichloro-	93	95-50-1	*oder Isomer
998	10,73	4,2	– 16,9	d	81	54,67,82	unbekannt			Hiwweis auf alkylsubstituiertes Cyclohexen oder Isomer
1268	12,22	5,5	– 21,9	b	110		Phenol, 2-ethoxy-	92	94-71-3	
1359	12,73	0,1	– 0,4	b	121		Benzenamine, 2,4-dimethyl-	92	95-68-1	
1479	13,39	1,0	– 4,1	b	127		m-Chloroaniline	94	108-42-9	oder Isomer
1494	13,47	0,3	– 1,2	b	127		p-Chloroaniline	94	106-47-8	oder Isomer
1718	14,72	0,9	– 3,7	b	124		2-Ethoxy-4-methylphenol	93	2563-07-7	
1739	14,83	0,1	– 0,4	b	135		Benzenamine, 2,4,6-trimethyl-	89	88-05-1	
1773	15,02	0,1	– 0,5	b	125		4-Chloro-2-methylthiophenol	83	17178-01-7	
1872	15,57	0,9	– 3,6	b	141		Benzenamine, 3-chloro-2-methyl-	92	87-60-5	oder Isomer
1903	15,74	1,0	– 3,9	b	141		Benzenamine, 4-chloro-2-methyl-	89	95-69-2	oder Isomer
2035	16,47	0,7	– 2,6	b	161		Benzenamine, 2,5-dichloro-	92	95-82-9	oder Isomer
2100	16,83	0,5	– 2,1	d	134	106,133,144	unbekannt			
2223	17,51	0,1	– 0,3	c	162		Naphthalene, 1-chloro-	89	90-13-1	oder Isomer
2266	17,75	0,1	– 0,4	b	77		Sulfone, methyl phenyl	85	3112-85-4	oder Isomer
2304	17,96	5,9	– 23,6	b	135		Phenol, 4-(1,1-dimethylpropyl)-	93	80-46-6	
2392	18,45	0,7	– 2,6	d	95	43,137,182	unbekannt			
2425	18,63	0,5	– 2,1	b	161		Benzenamine, 2,4-dichloro-	90	554-00-7	oder Isomer
2687	20,08	4,9	– 19,6	d	138	94,122,167	unbekannt			
2715	20,24	0,4	– 1,5	d	92	107,121,122	unbekannt			
2805	20,74	6,4	– 25,6	c	143		1-Naphthalenamine	92	134-32-7	oder Isomer
2842	20,94	0,6	– 2,5	b	111		Benzene, 1-chloro-4-(methylsulfonyl)-	82	98-57-7	
2887	21,19	0,4	– 1,6	d	110	43,140,205	unbekannt			
2939	21,48	0,3	– 1,1	d	43	45,59,171	unbekannt			
2971	21,66	0,6	– 2,4	d	110	42,138,183	unbekannt			
3008	21,86	1,4	– 5,6	d	169	43,168,205	unbekannt			
3083	22,28	32,8	– 131,1	d	43		(2,2,5,5-Tetramethyl-tetrahydro-1,3,4,6,8-pentaoxa-cyclopenta[a]inden-8a-yl)-methanol	91	NA	
3186	22,85	3,2	– 12,6	b	91		Benzene, (1,1-diethylpropyl)-	88	4170-84-7	oder Isomer
3206	22,96	0,7	– 2,6	d	43	59,101,143	unbekannt			
3276	23,35	0,7	– 2,9	b	91		Benzenesulfonamide, 4-methyl-	89	70-55-3	
3308	23,53	0,6	– 2,4	d	144	103,130,169	unbekannt			
3341	23,71	0,7	– 2,8	d	43		2,2,7,7-Tetramethyl-tetrahydro-bis[1,3]dioxolo[4,5-b;4',5'-d]pyran-3a-carboxylic acid	93	NA	
3363	23,83	0,2	– 0,8	d	137	108,109,137	unbekannt			
3432	24,21	0,9	– 3,5	d	59	43,73,131	unbekannt			
3458	24,36	0,6	– 2,3	d	131	43,72,73	unbekannt			
3525	24,73	2,4	– 9,6	d	43		2,2,5,5-Tetramethyldihydro-1,3,4,6,8-pentaoxacyclopenta[a]indene-3a-carboxylic acid	89	NA	
3544	24,83	0,8	– 3,4	d	134	43,138,223	unbekannt			

Auftraggeber
Projekt
Auftrag Nr.
Datum

Harress Pickel Consult AG
DU II Kesslergrube, Grenzach Wyhlen
A10-01340
27.09.2010

Anhang: **3**

Probenbezeichnung: KE 30				Int. Probennummer: M1007-05744					
Interne Standards									
Nr.	Name des Internen		Konzentration		Wiederfindung (%)		Bemerkungen		
a	Anilin d5		1,1		29				
b	Nitrobenzol d5		1,1		85				
c	Naphthalin d8		1,1		82				
d	1-Chlorododecan		1,1		89				
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
3610	25,20	0,4	– 1,8 d	43	59,69,171	unbekannt			
3650	25,42	2,7	– 10,9 d	141	43,77,170	unbekannt			
3675	25,56	2,3	– 9,3 d	174	77,142,216	unbekannt			Acetyl an vermutlich Tetrahydronaphthalin + Alkylgruppen
3728	25,85	2,5	– 10,0 d	93		1-Phenyl-3-methyl-4-hydroxy-(prop-2-yl)-2,5-dihydropyrazole-5-one	94		Wiley9
3764	26,05	0,8	– 3,3 d	246	173,201,217	unbekannt			
3865	26,61	2,4	– 9,5 d	136	154,182,183	unbekannt			
3911	26,87	2,3	– 9,2 b	189		Glutethimide	90	77-21-4	
3961	27,14	2,5	– 10,1 b	188		Antipyrine	91	60-80-0	
4049	27,63	8,2	– 32,7 d	202	56,77,110	unbekannt			Sehr wenig Information im MS. besteht aus Phenyl + Teilst. 110 u + Rest 15 u. Aromatisch. Geradz. Anz. N. A
4103	27,93	0,3	– 1,0 d	217	189,216,290	unbekannt			
4191	28,42	4,0	– 16,1 b	215		Propyphenazone	90	479-92-5	
4328	29,18	0,9	– 3,7 d	235	96,109,281	unbekannt			
4358	29,34	0,9	– 3,7 d	64		Cyclic octaatomic sulfur	89	10544-50-0	
4446	29,83	0,6	– 2,5 d	169	115,129,142	unbekannt			
4460	29,91	0,6	– 2,5 d	43	99,113,171	unbekannt			Hinweis auf zuckerähnliche Verbindung
4747	31,50	1,4	– 5,6 d	73		Octadecanoic acid	89	57-11-4	
4769	31,62	0,4	– 1,5 d	91	119,135,162	unbekannt			
4921	32,46	0,5	– 2,1 b	159		Benzene, 1,1'-sulfonylbis[4-chloro-	88	80-07-9	
4921	32,46	1,2	– 4,7 d	159	75,111,161	unbekannt			
5173	33,86	3,0	– 11,9 d	136	122,236,281	unbekannt			
5368	34,94	1,4	– 5,5 d	193	194,239,323	unbekannt			
5641	36,45	0,4	– 1,7 b	277		Triphenylphosphine oxide	89	791-28-6	
5969	38,27	1,3	– 5,1 d	113	43,59,243	unbekannt			
6011	38,50	0,3	– 1,2 d	43	59,73,113	unbekannt			
6087	38,93	2,7	– 10,8 d	113	43,101,243	unbekannt			Hinweis auf zuckerähnliche Verbindung
6130	39,16	2,3	– 9,2 d	113	43,101,243	unbekannt			
6181	39,45	0,4	– 1,7 d	113	43,59,238	unbekannt			

Aufkonzentrierungsfaktor: 918
Bestimmungsgrenze in µg/l (Naphthalin d8): 0,12

Die Bestimmungsgrenze wurde anhand der von Prof. Dr. M. Oehme zusätzlich identifizierten Substanzen angepasst.

Rot und Kursiv: Kommentare von Prof. Dr. M. Oehme (Institut für Angewandte Analytische Chemie, Niederteufen, Schweiz)

Auftraggeber
Projekt
Auftrag Nr.
Datum

Harress Pickel Consult AG
DU II Kesslergrube, Grenzach Wyhlen
A10-01340
30.09.2010

Anhang: **4**

Probenbezeichnung: KE 31						Int. Probennummer:		M1007-05745		
Interne Standards										
Nr.		Name des Internen		Konzentration		Wiederfindung (%)		Bemerkungen		
a		Anilin d5		1,1		25				
b		Nitrobenzol d5		1,1		84				
c		Naphthalin d8		1,1		75				
d		1-Chlorododecan		1,1		90				
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
676	8,94	0,5	–	2,0	d	83	43,56,141	unbekannt		
997	10,72	1,3	–	5,4	d	81	54,67,82	unbekannt		Hinweis auf alkylsubstituiertes Cyclohexen oder Isomer
1270	12,23	1,0	–	4,1	b	110		Phenol, 2-ethoxy-	92	94-71-3
1720	14,73	0,2	–	0,7	b	124		2-Ethoxy-4-methylphenol	85	2563-07-7
1873	15,57	0,3	–	1,1	b	141		Benzenamine, 3-chloro-2-methyl-	88	87-60-5
1903	15,74	0,3	–	1,3	b	141		Benzenamine, 4-chloro-2-methyl-	84	95-69-2
1957	16,04	0,1	–	0,4	d	43	85,99,127	unbekannt		
2035	16,47	0,2	–	0,8	b	161		Benzenamine, 2,3-dichloro-	88	608-27-5
2100	16,83	0,2	–	0,9	d	144	106,133,134	unbekannt		
2303	17,96	1,8	–	7,3	b	135		Phenol, 4-(1,1-dimethylpropyl)-	93	80-46-6
2392	18,45	0,3	–	1,3	d	95	43,109,151	unbekannt		
2425	18,63	0,1	–	0,4	b	161		Benzenamine, 3,5-dichloro-	81	626-43-7
2678	20,03	0,7	–	2,7	d	138	91,122,167	unbekannt		
2709	20,21	0,1	–	0,4	d	92	107,121,122	unbekannt		
2741	20,38	0,2	–	0,7	d	205	57,191,220	unbekannt		
2802	20,72	1,0	–	4,2	c	143		1-Naphthalenamine	91	134-32-7
2839	20,93	0,6	–	2,2	b	111		Benzene, 1-chloro-4-(methylsulfonyl)-	84	98-57-7
2950	21,54	0,2	–	0,7	d	110	111,138,183	unbekannt		
3007	21,86	0,4	–	1,7	d	169	116,167,168	unbekannt		
3071	22,21	9,9	–	39,7	d	43		(2,2,5,5-Tetramethyl-tetrahydro-1,3,4,6,8-pentaoxa-cyclopenta[a]inden-8a-yl)-methanol	91	NA
3180	22,82	1,3	–	5,3	b	91		Benzene, (1,1-diethylpropyl)-	83	4170-84-7
3205	22,95	0,2	–	0,9	d	43	59,101,143	unbekannt		
3266	23,29	0,3	–	1,4	b	91		Benzenesulfonamide, 4-methyl-	75	70-55-3
3306	23,51	0,2	–	0,8	d	144	103,130,169	unbekannt		
3340	23,70	0,1	–	0,5	d	43		2,2,7,7-Tetramethyl-tetrahydro-bis[1,3]dioxolo[4,5-b;4',5'-d]pyran-3a-carboxylic acid	86	NA
3430	24,20	0,3	–	1,0	d	131	43,59,73	unbekannt		Hinweis auf zuckerähnliche Verbindung
3458	24,36	0,2	–	0,6	d	131	43,72,73	unbekannt		
3480	24,48	0,3	–	1,0	d	123	94,122,134	unbekannt		
3505	24,62	0,4	–	1,6	d	123	94,122,134	unbekannt		
3520	24,70	0,9	–	3,4	d	43		2,2,5,5-Tetramethyldihydro-1,3,4,6,8-pentaoxacyclopenta[a]indene-3a-carboxylic acid	87	NA
3541	24,82	0,2	–	0,7	d	134	43,138,223	unbekannt		
3610	25,20	0,2	–	0,9	d	150	43,59,195	unbekannt		

Auftraggeber
Projekt
Auftrag Nr.
Datum

Harress Pickel Consult AG
DU II Kesslergrube, Grenzach Wyhlen
A10-01340
30.09.2010

Anhang: 4

Probenbezeichnung: KE 31				Int. Probennummer:				M1007-05745			
Interne Standards											
Nr.		Name des Internen		Konzentration		Wiederfindung (%)		Bemerkungen			
a		Anilin d5		1,1		25					
b		Nitrobenzol d5		1,1		84					
c		Naphthalin d8		1,1		75					
d		1-Chlorododecan		1,1		90					
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	
3648	25,41	0,9	– 3,6 d	43	59,97,109	unbekannt					
3672	25,54	0,3	– 1,4 d	174	77,105,216	unbekannt				Acetyl an vermutlich Tetrahydronaphthalin + Alkylgruppen	
3723	25,83	0,7	– 2,9 d	43		1-Phenyl-3-methyl-4-hydroxy-(prop-2-yl)-2,5-dihydropyrazole-5-one		84		Wiley9	
3761	26,04	0,2	– 0,9 d	246	66,173,201	unbekannt					
3802	26,26	0,2	– 0,7 d	94	106,123,152	unbekannt					
3843	26,49	0,4	– 1,7 d	136	154,182,183	unbekannt					
3908	26,85	0,8	– 3,3 b	189		Glutethimide		87	77-21-4		
3950	27,08	0,8	– 3,0 b	188		Antipyrine		89	60-80-0		
4001	27,37	0,1	– 0,5 b	235		Benzoic acid, 3,5-bis(1,1-dimethylethyl)-4-hydroxy-		83	1421-49-4		
4039	27,58	3,4	– 13,6 d	202	56,77,110	unbekannt				Sehr wenig Information im MS. besteht aus Phenyl + Teilst. 110 u + Rest 15 u. Aromatisch. Geradz. Anz. N. A	
4101	27,92	0,1	– 0,4 d	217	189,216,290	unbekannt					
4171	28,31	0,2	– 0,7 b	90		Benzenamine, 2-chloro-4-(methylsulfonyl)-		79	13244-35-4		
4187	28,40	1,1	– 4,5 b	215		Propylphenazone		87	NA		
4283	28,93	0,2	– 1,0 b	263		3,5-di-tert-Butyl-4-hydroxyphenylpropionic acid		84	20170-32-5		
4324	29,16	0,3	– 1,3 d	235	96,109,281	unbekannt					
4441	29,80	0,3	– 1,3 d	169	115,129,142	unbekannt					
4459	29,90	0,2	– 0,7 d	43	99,113,171	unbekannt					
4473	29,98	0,1	– 0,5 d	230	77,231,232	unbekannt					
4721	31,36	0,1	– 0,6 b	168		2-Aminodiphenylsulfone		83	4273-98-7		
4766	31,60	0,1	– 0,5 d	91	119,135,162	unbekannt					
4844	32,04	0,4	– 1,6 d	137	165,166,193	unbekannt					
4920	32,46	0,8	– 3,2 b	159		Benzene, 1, 1'-sulfonylbis[4-chloro-		93	80-07-9		
4977	32,77	0,4	– 1,5 d	112	70,92,93	unbekannt					
5148	33,72	1,0	– 4,2 d	136	122,236,281	unbekannt					
5244	34,25	0,1	– 0,4 d	59	55,69,72	unbekannt					
5260	34,34	0,2	– 0,9 d	59	43,55,72	unbekannt					
5364	34,92	0,5	– 2,0 d	193	194,239,323	unbekannt					

Auftraggeber
Projekt
Auftrag Nr.
Datum

Harress Pickel Consult AG
DU II Kesslergrube, Grenzach Wyhlen
A10-01340
30.09.2010

Anhang: **4**

Probenbezeichnung: KE 31				Int. Probennummer: M1007-05745			
Interne Standards							
Nr.	Name des Internen	Konzentration	Wiederfindung (%)		Bemerkungen		
a	Anilin d5	1,1	25				
b	Nitrobenzol d5	1,1	84				
c	Naphthalin d8	1,1	75				
d	1-Chlorododecan	1,1	90				
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
5421	35,23	0,6 – 2,2 d	178 160,164,206	unbekannt			
5633	36,41	0,2 – 0,7 b	277	Triphenylphosphine oxide	86	791-28-6	
5965	38,27	0,4 – 1,8 d	113 43,59,243	unbekannt			Hinweis auf zuckerähnliche Verbindung
6085	38,91	0,9 – 3,5 d	113 43,59,243	unbekannt			Hinweis auf zuckerähnliche Verbindung
6449	40,93	0,4 – 1,5 d	57 43,71,85	unbekannt			
6609	41,82	0,2 – 1,0 d	317 197,273,300	unbekannt			
6846	43,13	0,1 – 0,5 d	312 207,311,342	unbekannt			

Aufkonzentrierungsfaktor: 942
Bestimmungsgrenze in µg/l (Naphthalin d8): 0,16

Die Bestimmungsgrenze wurde anhand der von Prof. Dr. M. Oehme zusätzlich identifizierten Substanzen angepasst.

Rot und Kursiv: Kommentare von Prof. Dr. M. Oehme (Institut für Angewandte Analytische Chemie, Niederteufen, Schweiz)

Auftraggeber
Projekt
Auftrag Nr.
Datum

Harress Pickel Consult AG
DU II Kesslergrube, Grenzach Wyhlen
A10-01340
27.09.2010

Anhang: 5

Probenbezeichnung: KE 23a					Int. Probennummer:		M1007-05746			
Interne Standards										
Nr.	Name des Internen		Konzentration		Wiederfindung (%)		Bemerkungen			
a	Anilin d5		1,2		21					
b	Nitrobenzol d5		1,2		83					
c	Naphthalin d8		1,2		75					
d	1-Chlorododecan		1,2		89					
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
565	8,33	0,2	–	1 d	99	43,71	unbekannt			Ein Hexansäureester
1006	10,77	25	–	102 d	81	54,67,82	unbekannt			Hinweis auf alkylsubstituiertes Cyclohexen oder Isomer
1081	11,19	0,2	–	1 d	81	67,68,79	unbekannt			
1275	12,26	0,05	–	0,2 b	110		Phenol, 2-ethoxy-	82	94-71-3	
1512	13,57	1	–	3 d	67	41,82,140	unbekannt			
2295	17,91	0,3	–	1 d	109	43,82,152	unbekannt			
2679	20,04	0,1	–	0,5 d	138	94,122,167	unbekannt			
3029	21,98	0,3	–	1 d	85	67,113,188	unbekannt			
3067	22,19	4	–	15 d	43		(2,2,5,5-Tetramethyl-tetrahydro-1,3,4,6,8-pentaoxa-cyclopenta[a]inden-8a-yl)-methanol	94	NA	
3339	23,70	0,2	–	1 d	43		2,2,7,7-Tetramethyl-tetrahydro-bis[1,3]dioxolo[4,5-b;4',5'-d]pyran-3a-carboxylic acid	90	NA	
3432	24,21	0,2	–	1 d	59	43,71,99	unbekannt			Hinweis auf zuckerähnliche Verbindung
3650	25,42	8	–	32 b	141		Benzenesulfonamide, N-butyl-	91	3622-84-2	
3761	26,04	0,2	–	1 d	0	0,00	unbekannt			
3842	26,49	2	–	6 d	136	154,182,183	unbekannt			
4195	28,44	0,3	–	1 d	193	165,166,194	unbekannt			
4356	29,33	0,3	–	1 d	64		Cyclic octaatomic sulfur	93	10544-50-0	
4841	32,02	0,3	–	1 d	137	165,166,193	unbekannt			
5142	33,69	1	–	3 d	136	122,236,281	unbekannt			
5362	34,91	1	–	3 d	193	194,239,323	unbekannt			
5407	35,16	1	–	4 d	178	160,164,206	unbekannt			
6087	38,93	0,1	–	0,5 d	113	43,101,243	unbekannt			Hinweis auf zuckerähnliche Verbindung
6130	39,16	0,1	–	0,4 d	113	43,101,243	unbekannt			Hinweis auf zuckerähnliche Verbindung

Aufkonzentrierungsfaktor: 862

Bestimmungsgrenze in µg/l (Naphthalin d8): 0,07

Die Bestimmungsgrenze wurde anhand der von Prof. Dr. M. Oehme zusätzlich identifizierten Substanzen angepasst.

Rot und Kursiv: Kommentare von Prof. Dr. M. Oehme (Institut für Angewandte Analytische Chemie, Niederteufen, Schweiz)

Auftraggeber
Projekt
Auftrag Nr.
Datum

Harress Pickel Consult AG
DU II Kesslergrube, Grenzach Wyhlen
A10-01340
27.09.2010

Anhang: **6**

Probenbezeichnung: Blindprobe 28					Int. Probennummer: M1007-05747					
Interne Standards										
Nr.	Name des Internen		Konzentration		Wiederfindung (%)		Bemerkungen			
a	Anilin d5		1,2		36					
b	Nitrobenzol d5		1,2		69					
c	Naphthalin d8		1,2		73					
d	1-Chlorododecan		1,2		77					
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
852	9,92	0,04	–	0,1 b	106		Aniline, N-methyl-	83	100-61-8	
4070	27,75	0,02	–	0,1 b	86		Diphenylsulfone	81	127-63-9	plus Interferenz m/z 86
4221	28,58	0,02	–	0,1 b	211		Benzothiazole, 2-phenyl	75	883-93-2	
4842	32,03	0,02	–	0,1 d	71	43,57,85	unbekannt			Hinweis auf ein Kohlenwasserstoff
5098	33,44	0,03	–	0,1 d	71	43,55,57	unbekannt			Hinweis auf ein Kohlenwasserstoff
5243	34,25	0,05	–	0,2 d	59	44,55,72	unbekannt			Hinweis auf ein Alkyldecenamid

Aufkonzentrierungsfaktor: 1055

Bestimmungsgrenze in µg/l (Naphthalin d8): 0,02

Die Bestimmungsgrenze wurde anhand der von Prof. Dr. M. Oehme zusätzlich identifizierten Substanzen angepasst.

Rot und Kursiv: Kommentare von Prof. Dr. M. Oehme (Institut für Angewandte Analytische Chemie, Niederteufen, Schweiz)

Auftraggeber
Projekt
Auftrag Nr.
Datum

Harress Pickel Consult AG
DU II Kesslergrube, Grenzach Wyhlen
A10-01340
30.09.2010

Anhang: **7**

Probenbezeichnung: Blindprobe 29				Int. Probennummer:		M1007-05748	
Interne Standards							
Nr.	Name des Internen	Konzentration	Wiederfindung (%)		Bemerkungen		
a	Anilin d5	1,1	34				
b	Nitrobenzol d5	1,1	76				
c	Naphthalin d8	1,1	76				
d	1-Chlorododecan	1,1	89				
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
852	9,92	0,1 – 0,2 b	106	Aniline, N-methyl-	91	100-61-8	
1063	11,09	0.02 – 0,1 d	57	43,44,70 unbekannt			
2048	16,54	0,02 – 0,1 d	73	Cyclohexasiloxane, dodecamethyl-	84	540-97-6	
2706	20,19	0,05 – 0,2 d	73	147,281,327 unbekannt			
2742	20,39	0,02 – 0,1 d	191	192,205,206 unbekannt			
4070	27,75	0,02 – 0,1 b	125	Diphenylsulfone	85	127-63-9	
4221	28,58	0,04 – 0,1 b	211	Benzothiazole, 2-phenyl-	85	883-93-2	
4765	31,60	0,04 – 0,1 d	185	Decanedioic acid, dibutyl ester	84	109-43-3	
4783	31,70	0,03 – 0,1 d	59	43,44,72 unbekannt			
4842	32,03	0,03 – 0,1 d	57	43,71,99 unbekannt			
4868	32,17	0,02 – 0,1 d	43	61,69,97 unbekannt			
5098	33,44	0,04 – 0,2 d	57	43,71,85 unbekannt			
5244	34,25	0,1 – 0,5 d	59	44,55,72 unbekannt			
5260	34,34	0,1 – 0,6 d	59	9-Octadecenamide, (Z)-	81	301-02-0	oder Homolog
6932	43,61	0,02 – 0,1 d	207	57,71,281 unbekannt			
7089	44,48	0,02 – 0,1 d	207	57,71,281 unbekannt			

Aufkonzentrierungsfaktor: 1179

Bestimmungsgrenze in µg/l (Naphthalin d8): 0,02

Die Bestimmungsgrenze wurde anhand der von Prof. Dr. M. Oehme zusätzlich identifizierten Substanzen angepasst.

Rot und Kursiv: Kommentare von Prof. Dr. M. Oehme (Institut für Angewandte Analytische Chemie, Niederteufen, Schweiz)



Labors: Analytik, Ökotoxikologie,
Verfahrenstechnik

ANALYSEN-BERICHT

HPC Harress Pickel Consult AG
Martin Steckermeier
Nansenstrasse 5
79539 Lörrach

Schlieren, 14. Oktober 2010

Projekt: DU II "Kesslergrube", Grenzach-Wyhlen
BMG Auftragsnummer: A10-01370
Datum Auftrag: 22. Juli 2010
Datum Analysen: 22. Juli - 14. Oktober 2010

Probenliste & Untersuchungsauftrag

Anzahl Proben 7

Parameter	Anz.	Bestimmungsmethode	BMG SAA-Nr
Screening organische Substanzen	7	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.bmgeng.ch

Seite 1 von 3



S SCHWEIZERISCHER PRÜFSTELLENDIENST
T SERVICE D'ESSAI
T 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
A10-01370
14.10.2010

Probenbezeichnung	Blindprobe 32	KE 43 / 2	KE 29	Blindprobe 33		
Tiefe						
Datum Probenahme						
Interne Probenbezeichnung	M1007-05825	M1007-05827	M1007-05898	M1007-05899		
Datum Probeneingang	22.07.2010	22.07.2010	23.07.2010	23.07.2010		
Probenart	Wasser	Wasser	Wasser	Wasser		
Organische Summenparameter						
Screening organische Substanzen	siehe Anhang 1	siehe Anhang 2	siehe Anhang 3	siehe Anhang 4		

Probenbezeichnung	Blindprobe 34	P 12	P 4			
Tiefe						
Datum Probenahme						
Interne Probenbezeichnung	M1007-05902	M1007-05903	M1007-05904			
Datum Probeneingang	26.07.2010	26.07.2010	26.07.2010			
Probenart	Wasser	Wasser	Wasser			
Organische Summenparameter						
Screening organische Substanzen	siehe Anhang 5	siehe Anhang 6	siehe Anhang 7			

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	<div> Gaschromatograph: Säule: Injektion: Temperaturprogramm: Massenselektiver Detektor: Ionisierung: Massen: Scangeschwindigkeit Bibliothek: </div> <div> Finnigan: Trace Ultra DB5ms, 30m x 0.25 mm, 0.25 µm 2 µl; Splitless 40°C, 2 Min.; 6°C/Min bis 280°C; 10°C bis 300°C; 6 Min. Single Quadrupole EI; 70 eV 33 - 500 m/z 3 Scans/Sek. NIST 08 </div>



Labors: Analytik, Ökotoxikologie,
Verfahrenstechnik

Generelle Bemerkungen zu den Screenings

Alle Identifikationen sind tentativ, solange diese nicht mit Referenzverbindungen bestätigt worden sind.

% 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

Harress Pickel Consult AG
DU II Kesslergrube, Grenzach Wyhlen
A10-01370
16.08.2010

Anhang: **1**

Probenbezeichnung: Blindprobe 32				Int. Probennummer:		M1007-05825-01		
Interne Standards								
Nr.	Name des Internen		Konzentration	Wiederfindung (%)		Bemerkungen		
a	Anilin d5		1,1	22				
b	Nitrobenzol d5		1,1	69				
c	Naphthalin d8		1,1	78				
d	1-Chlorododecan		1,1	91				
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
3923	26,94	0,6	– 2,4 d	57	73,141,171	unbekannt		
6186	39,48	1,0	– 3,9 d	59	55,69,72	unbekannt		*

Aufkonzentrierungsfaktor: 920
Bestimmungsgrenze in µg/l: 0,05

Auftraggeber
Projekt
Auftrag Nr.
Datum

Harress Pickel Consult AG
DU II Kesslergrube, Grenzach Wyhlen
A10-01370
29.09.2010

Anhang: **3**

Probenbezeichnung: KE 43/2					Int. Probennummer:		M1007-05827-01		
Interne Standards									
Nr.	Name des Internen		Konzentration		Wiederfindung (%)		Bemerkungen		
a	Anilin d5		49,8		26				
b	Nitrobenzol d5		49,8		81				
c	Naphthalin d8		49,8		84				
d	1-Chlorododecan		49,8		89				
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
371	7,25	11,8	– 47,3	a	93	Aniline	87	62-53-3	
886	10,11	3,4	– 13,8	b	106	Aniline, N-methyl-	86	100-61-8	
991	10,69	96,3	– 385,2	d	81	67,79,82 unbekannt			Hinweis auf alkylsubstituiertes Cyclohexen oder isomer
1473	13,36	6,7	– 26,9	b	121	Benzenamine, 3,4-dimethyl-	89	95-64-7	oder Isomer
1815	15,25	4,8	– 19,4	d	57	43,98,129 unbekannt			
1843	15,41	5,6	– 22,6	b	134	Benzenamine, 2,4,6-trimethyl-	82	88-05-1	oder Isomer
1954	16,02	14,2	– 57,0	d	85	43,99,127 unbekannt			Kettige Verbindung mit O-Funktionen
2098	16,82	15,0	– 60,1	d	134	106,133,179 unbekannt			Teilstruktur Pyridin plus Acetatgruppe
2294	17,91	2,6	– 10,3	d	109	43,82,152 unbekannt			
2390	18,44	4,4	– 17,7	d	182	95,137,153 unbekannt			
2640	19,83	3,6	– 14,3	d	192	Sulfur S6	90	13798-23-7	
2675	20,02	21,0	– 84,1	d	138	3-Ethoxycarbonyl-2,5-dimethylpyrrole	83	484-93-5	Wiley9
2944	21,51	9,5	– 38,1	d	110	111,138,183 unbekannt			Teilstruktur Ethoxyphenol
2956	21,58	3,2	– 12,8	d	151	2H-Pyran-5-carboxylic acid, 4,6-dimethyl-2-oxo-, ethyl ester	80	3385-34-0	
2957	21,58	3,4	– 13,7	d	151	2H-Pyran-5-carboxylic acid, 4,6-dimethyl-2-oxo-, ethyl ester	80	3385-34-0	
2996	21,80	5,9	– 23,7	d	134	43,157,205 unbekannt			
3004	21,84	5,0	– 20,1	d	169	69,168,245 unbekannt			Teilstruktur Biphenylamin oder Isomer
3064	22,18	19,4	– 77,5	d	245	(2,2,5,5-Tetramethyl-tetrahydro-1,3,4,6,8-pentaoxa-cyclopenta[a]inden-8a-yl)-methanol	90	NA	
3192	22,89	2,9	– 11,5	d	135	85,107,133 unbekannt			
3283	23,39	5,3	– 21,3	d	43	99,128,155 unbekannt			
3431	24,21	4,2	– 16,6	d	99	43,59,71 unbekannt			
3538	24,80	5,5	– 22,1	d	134	138,166,223 unbekannt			
3603	25,16	10,0	– 40,0	d	150	64,160,195 unbekannt			
3644	25,39	2,3	– 9,3	d	49	96,124,170 unbekannt			
3757	26,02	5,8	– 23,2	d	246	173,201,217 unbekannt			
3835	26,45	65,7	– 262,8	d	182	131,154,183 unbekannt			
3870	26,64	4,7	– 18,9	d	221	43,119,205 unbekannt			
4097	27,90	3,1	– 12,5	d	217	189,216,290 unbekannt			
4181	28,37	17,3	– 69,4	d	215	Hexadecanoic acid			plus Koelution m/z 215/230
4194	28,44	127,1	– 508,3	d	193	165,166,194 unbekannt			Hinweis N-aromatische Verbindung
4319	29,13	7,2	– 28,8	d	235	64,96,281 unbekannt			
4351	29,31	192,3	– 769,3	d	64	Cyclic octaatomic sulfur	90	10544-50-0	
4496	30,11	4,0	– 16,0	d	140	59,185,214 unbekannt			
4816	31,88	26,5	– 106,1	d	206	178,249,250 unbekannt			
4836	32,00	9,6	– 38,4	d	137	165,166,193 unbekannt			
4863	32,15	17,2	– 68,8	d	137	165,166,193 unbekannt			
5093	33,42	23,4	– 93,8	d	190	162,191,236 unbekannt			

Auftraggeber
Projekt
Auftrag Nr.
Datum

Harress Pickel Consult AG
DU II Kesslergrube, Grenzach Wyhlen
A10-01370
29.09.2010

Anhang: **3**

Probenbezeichnung: KE 43/2				Int. Probennummer: M1007-05827-01				
Interne Standards								
Nr.	Name des Internen	Konzentration	Wiederfindung (%)		Bemerkungen			
a	Anilin d5	49,8	26					
b	Nitrobenzol d5	49,8	81					
c	Naphthalin d8	49,8	84					
d	1-Chlorododecan	49,8	89					
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
5135	33,65	47,8 – 191,3 d	136	122,236,281	unbekannt			
5254	34,31	7,8 – 31,0 d	59	44,72,342	unbekannt			
5295	34,54	7,3 – 29,2 d	135	207,209,253	unbekannt			
5339	34,78	10,0 – 39,9 d	57	71,85,274	unbekannt			
5357	34,88	19,3 – 77,3 d	193	194,239,323	unbekannt			
5525	35,81	5,2 – 20,6 d	99	57,71,113	Bis(2-ethylhexyl)hydrogen phosphate	77	298-07-7	oder anderes Alkylphosphat
6140	39,22	5,0 – 19,9 d	238	164,193,294	unbekannt			
6192	39,51	5,4 – 21,7 d	238	164,193,294	unbekannt			

Aufkonzentrierungsfaktor: 15
Bestimmungsgrenze in µg/l (Naphthalin d8): 4

Die Bestimmungsgrenze wurde anhand der von Prof. Dr. M. Oehme zusätzlich identifizierten Substanzen angepasst.

Rot und Kursiv: Kommentare von Prof. Dr. M. Oehme (Institut für Angewandte Analytische Chemie, Niederteufen, Schweiz)

Auftraggeber
Projekt
Auftrag Nr.
Datum

Harress Pickel Consult AG
DU II Kesslergrube, Grenzach Wyhlen
A10-01370
29.09.2010

Anhang: 4

Probenbezeichnung: KE 29				Int. Probennummer: M1007-05898-01						
Interne Standards										
Nr.	Name des Internen		Konzentration		Wiederfindung (%)		Bemerkungen			
a	Anilin d5		9,9		24					
b	Nitrobenzol d5		9,9		85					
c	Naphthalin d8		9,9		92					
d	1-Chlorododecan		9,9		98					
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
674	8,93	1,5	–	5,9 d	83		Benzene, 1,4-dichloro-	83	106-46-7	oder Isomer, Interferenz durch Scan 677
851	9,91	0,3	–	1,1 d	106		Aniline, N-methyl-	91	100-61-8	
995	10,71	6,7	–	26,9 d	81	67,79,82	unbekannt			Hinweis auf alkylsubstituiertes Cyclohexen oder Isomer
1151	11,57	0,3	–	1,0 b	127		o-Chloroaniline	85	95-51-2	oder Isomer
1267	12,22	6,9	–	27,5 b	110		Phenol, 2-ethoxy-	91	94-71-3	
1481	13,40	1,0	–	4,1 b	127		m-Chloroaniline	89	108-42-9	oder Isomer
1720	14,73	0,6	–	2,2 b	124		2-Ethoxy-4-methylphenol	87	2563-07-7	
1872	15,57	0,6	–	2,3 b	141		Benzenamine, 3-chloro-2-methyl-	88	87-60-5	oder Isomer
1905	15,75	0,4	–	1,6 b	141		Benzenamine, 3-chloro-2-methyl-	86	87-60-5	oder Isomer
1956	16,04	1,2	–	4,7 d	43	85,99,127	unbekannt			
2035	16,47	0,4	–	1,6 b	161		Benzenamine, 2,3-dichloro-	87	608-27-5	oder Isomer
2103	16,85	0,4	–	1,6 d	134	106,133,179	unbekannt			Teilstruktur Pyridin plus Acetatgruppe
2300	17,94	7,2	–	28,9 b	135		Phenol, 4-(1,1-dimethylpropyl)-	92	80-46-6	
2393	18,46	0,6	–	2,5 d	95	43,137,182	unbekannt			
2554	19,35	0,2	–	0,8 d	43	141,151,152	unbekannt			
2639	19,82	0,3	–	1,2 d	192		Sulfur S6	93	13798-23-7	
2678	20,04	1,3	–	5,4 d	91	122,138,167	unbekannt			
2708	20,20	0,3	–	1,0 d	92	121,122,164	unbekannt			
2798	20,70	2,8	–	11,0 c	143		1-Naphthalenamine	91	134-32-7	
2842	20,95	0,2	–	0,8 d	111	128,175,190	unbekannt			
2944	21,51	0,5	–	2,2 d	110	111,138,183	unbekannt			
2958	21,59	0,1	–	0,5 d	139	122,140,151	unbekannt			
3004	21,84	1,7	–	6,7 d	169	167,168,205	unbekannt			Teilstruktur Biphenylamin oder Isomer
3041	22,05	0,9	–	3,4 b	136		Pyrrole-3-carboxylic acid, 4-formyl-5-methyl-, ethyl ester	86	332414-41-2	
3065	22,18	1,7	–	6,6 c	245		(2,2,5,5-Tetramethyldihydro-1,3,4,6,8-pentaoxacyclopenta[a]inden-3a-yl)methanol	89	NA	
3176	22,80	2,1	–	8,5 d	91	105,115,147	unbekannt			Alkylsubst. Benzol (verzweigte Kette)
3264	23,28	0,1	–	0,5 d	91		Benzenesulfonamide, 4-methyl-	68		plus Störung
3285	23,40	0,2	–	0,7 d	43	44,99,128	unbekannt			
3304	23,51	0,7	–	2,6 d	144	130,169,198	unbekannt			
3337	23,69	0,3	–	1,3 d	259		2,2,7,7-Tetramethyl-tetrahydro-bis[1,3]dioxolo[4,5-b;4',5'-d]pyran-3a-carboxylic acid	83		Teilweise Hintergrund
3431	24,21	0,6	–	2,4 d	99	43,59,135	unbekannt			
3539	24,81	0,2	–	0,9 d	134	138,166,223	unbekannt			
3594	25,11	1,2	–	4,6 d	150	67,195	unbekannt			
3649	25,42	1,0	–	4,1 d	142	115,129,144	unbekannt			

Auftraggeber
Projekt
Auftrag Nr.
Datum

Harress Pickel Consult AG
DU II Kesslergrube, Grenzach Wyhlen
A10-01370
29.09.2010

Anhang: **4**

Probenbezeichnung: KE 29				Int. Probennummer:			M1007-05898-01			
Interne Standards										
Nr.	Name des Internen		Konzentration		Wiederfindung (%)		Bemerkungen			
a	Anilin d5		9,9		24					
b	Nitrobenzol d5		9,9		85					
c	Naphthalin d8		9,9		92					
d	1-Chlorododecan		9,9		98					
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
3668	25,52	1,8	–	7,1 d	174	77,173,216	unbekannt			Acetylgruppe an Tetrahydronaphthalin plus Alkylgruppen, MW 216
3717	25,79	1,5	–	5,8 d	232		1-phenyl-3-methyl-4-hydroxy-4-(prop-2-yl)-2,5-dihydropyrazole-5-one	92		Wiley9
3758	26,02	0,7	–	2,7 d	246	173,201,217	unbekannt			
3834	26,44	4,7	–	18,8 d	182	136,154,183	unbekannt			
3904	26,83	3,0	–	12,0 d	149		Glutethimide	95	77-21-4	
3945	27,06	1,3	–	5,2 b	188		Antipyrine	89	60-80-0	
4030	27,53	9,7	–	38,8 d	202	56,77,110	unbekannt			Sehr wenig Information im MS, besteht aus Phenyl plus Teilstruktur 110 u plus Rest 15 u, Aromatisch, geradz. Anzahl N
4098	27,91	0,2	–	0,9 d	217	189,216,290	unbekannt			
4181	28,37	4,8	–	19,2 d	215		Propylphenazone	79	NA	Störung durch Phthalat
4215	28,55	0,4	–	1,6 d	211		Benzothiazole, 2-phenyl-	85	883-93-2	
4320	29,14	0,3	–	1,3 d	235	44,96,281	unbekannt			
4350	29,30	8,4	–	33,4 d	64		Cyclic octaatomic sulfur	91	10544-50-0	
4436	29,78	1,1	–	4,4 d	169	115,129,142	unbekannt			
4761	31,58	0,5	–	1,9 d	91	44,119,135	unbekannt			
4837	32,00	1,7	–	6,6 d	193	137,165,166	unbekannt			
4924	32,48	0,1	–	0,4 d	212	44,148,255	unbekannt			
4975	32,77	0,2	–	0,9 d	44	57,71,104	unbekannt			
5093	33,42	0,5	–	2,0 d	71	43,57,190	unbekannt			
5134	33,65	3,0	–	12,2 d	136	122,236,281	unbekannt			
5239	34,23	0,3	–	1,0 d	59	44,55,72	unbekannt			
5255	34,32	0,6	–	2,3 d	59	44,55,72	unbekannt			
5357	34,88	2,3	–	9,1 d	193	194,239,323	unbekannt			
5854	37,64	0,3	–	1,3 d	255	44,226,256	unbekannt			
6140	39,22	0,3	–	1,3 d	238	44,164,193	unbekannt			
6188	39,49	1,2	–	4,9 d	59	44,55,72	unbekannt			
6579	41,65	0,3	–	1,3 d	207	44,197,317	unbekannt			

Aufkonzentrierungsfaktor: 78
Bestimmungsgrenze in µg/l (Naphthalin d8): 0,15

Die Bestimmungsgrenze wurde anhand der von Prof. Dr. M. Oehme zusätzlich identifizierten Substanzen angepasst.

Rot und Kursiv: Kommentare von Prof. Dr. M. Oehme (Institut für Angewandte Analytische Chemie, Niederteufen, Schweiz)

Auftraggeber
Projekt
Auftrag Nr.
Datum

Harress Pickel Consult AG
DU II Kesslergrube, Grenzach Wyhlen
A10-01370
04.10.2010

Anhang: **5**

Probenbezeichnung: Blindprobe 33				Int. Probennummer: M1007-05899-01						
Interne Standards										
Nr.	Name des Internen		Konzentration		Wiederfindung (%)		Bemerkungen			
a	Anilin d5		1,2		34					
b	Nitrobenzol d5		1,2		89					
c	Naphthalin d8		1,2		93					
d	1-Chlorododecan		1,2		108					
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
2532	19,23	0,0	–	0,2 d	0		Carbonic acid, monoamide, N-methyl-N-phenyl-, propyl ester	84	NA	Ein aromatisches Carbamat
3061	22,16	0,2	–	0,6 d	177	43,59,178	unbekannt			
3245	23,18	0,0	–	0,2 d	177	43,59,178	unbekannt			
3924	26,94	0,5	–	1,8 d	57	73,141,171	unbekannt			Zuckerähnlich
4219	28,57	0,0	–	0,1 b	211		Benzothiazole, 2-phenyl-	79	883-93-2	ein Additiv
5524	35,81	0,1	–	0,5 d	171		Hexanoic acid, 2-ethyl-, 1,2-ethanediylobis(oxy-2,1,-ethanediylobis(o			

Aufkonzentrierungsfaktor: 563
Bestimmungsgrenze in µg/l (Naphthalin d8): 0,05

Die Bestimmungsgrenze wurde anhand der von Prof. Dr. M. Oehme zusätzlich identifizierten Substanzen angepasst.

Rot und Kursiv: Kommentare von Prof. Dr. M. Oehme (Institut für Angewandte Analytische Chemie, Niederteufen, Schweiz)

Auftraggeber
Projekt
Auftrag Nr.
Datum

Harress Pickel Consult AG
DU II Kesslergrube, Grenzach Wyhlen
A10-01370
16.08.2010

Anhang: **6**

Probenbezeichnung: Blindprobe 34				Int. Probennummer:			M1007-05902-01	
Interne Standards								
Nr.	Name des Internen		Konzentration	Wiederfindung (%)		Bemerkungen		
a	Anilin d5		1,2	32				
b	Nitrobenzol d5		1,2	90				
c	Naphthalin d8		1,2	89				
d	1-Chlorododecan		1,2	95				
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 Prof. M. Oehme
3925	26,95	0,3 – 1,1 d	57	73,141,171	unbekannt			Zuckerähnlich
6187					13-Docosenamide		112-84-5	Oder Homolog

Aufkonzentrierungsfaktor: 424
Bestimmungsgrenze in µg/l: 0,05

Auftraggeber
Projekt
Auftrag Nr.
Datum

Harress Pickel Consult AG
DU II Kesslergrube, Grenzach Wyhlen
A10-01370
06.10.2010

Anhang: **7**

Probenbezeichnung: P 12						Int. Probennummer:		M1007-05903-01			
Interne Standards											
Nr.	Name des Internen		Konzentration		Wiederfindung (%)		Bemerkungen				
a	Anilin d5		72,5		31						
b	Nitrobenzol d5		72,5		120						
c	Naphthalin d8		72,5		87						
d	1-Chlorododecan		72,5		72						
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
373	7,26	12	–	47 a	93		Aniline	86	52-53-3	*	
562	8,31	12	–	48 d	99		Hexanoic acid, anhydride	82	2051-49-2	oder Isomer	
848	9,90	3	–	14 b	106		Aminotoluene	85			
991	10,69	610	–	2442 d	81	67,79,82	unbekannt			Ein alkylsubst. Cyclohexen oder Isomer	
1991	16,23	1	–	6 d	147	43,83,162	unbekannt			Ein alkylsubst. Benzol, MW 162	
2097	16,82	27	–	107 d	134	106,133,179	unbekannt			Teilstruktur Pyridin plus Acetatgruppe	
2291	17,89	41	–	164 d	109	43,82,152	unbekannt				
2316	18,03	7	–	28 d	81	79,96,109	unbekannt			Substituiertes Cyclohexan	
2383	18,40	40	–	159 d	182	109,137,153	unbekannt				
2641	19,83	9	–	36 d	192		Sulfur S6	88	13798-23-7		
2675	20,02	19	–	75 d	138		3-Ethoxycarbonyl-2,5-dimethylpyrrole	85	484-93-5	Wiley9	
2920	21,38	3	–	12 d	69	95,125,169	unbekannt				
2945	21,52	8	–	32 d	110	111,138,183	unbekannt				
2957	21,58	4	–	15 d	139		2H-Pyran-5-carboxylic acid, 4,6-dimethyl-2-oxo-, ethyl ester	83	3385-34-0		
2994	21,79	17	–	69 d	134	43,157,205	unbekannt				
3004	21,84	6	–	24 d	134	205	unbekannt			Eine Zuckerart (Pyranose)	
3064	22,18	626	–	2506 d	245		(2,2,5,5-Tetramethyl-tetrahydro-1,3,4,6,8-pentaoxa-cyclopenta[a]inden-8a-yl)-methanol	93	NA		
3444	24,28	14	–	55 d	172	156,183,201	unbekannt				
3624	25,28	6	–	25 d	95	64,72,199	unbekannt				
3638	25,36	10	–	39 b	141		Benzenesulfonamide, N-butyl-	86	3622-84-2		
3678	25,58	6	–	22 d	134	95,180,225	unbekannt				
3757	26,02	7	–	29 d	246	173,201,217	unbekannt				
3770	26,09	10	–	42 d	189	131,133,161	unbekannt				
3802	26,27	20	–	80 d	118	194,209,224	unbekannt				
3833	26,44	74	–	297 d	182	136,154,183	unbekannt				
3869	26,64	9	–	37 d	221	119,161,205	unbekannt				
3948	27,07	11	–	43 d	239		1H-Pyrrole-2,4-dicarboxylic acid, 3,5-dimethyl-, diethyl ester	91	2436-79-5		
4131	28,09	6	–	26 d	179	151,152,180	unbekannt				
4199	28,47	456	–	1825 d	193	165,166,194	unbekannt			Aromatisch, N-haltig	
4319	29,13	20	–	81 d	235	64,96,281	unbekannt				
4353	29,32	406	–	1623 d	64		Cyclic octaatomic sulfur	90	10544-50-0		
4446	29,83	16	–	65 d	232	160,173,201	unbekannt				
4455	29,88	18	–	71 d	43	99,113,171	unbekannt			Zuckerähnlich	
4499	30,13	16	–	66 d	140	59,141,214	unbekannt				
4817	31,89	111	–	444 d	206	178,249,250	unbekannt				
4837	32,00	30	–	119 d	137	57,165,193	unbekannt				
4863	32,15	33	–	132 d	137	165,166,193	unbekannt				
4894	32,32	47	–	188 d	137	165,166,193	unbekannt				
5095	33,43	70	–	280 d	190	162,191,236	unbekannt				

Auftraggeber
Projekt
Auftrag Nr.
Datum

Harress Pickel Consult AG
DU II Kesslergrube, Grenzach Wyhlen
A10-01370
06.10.2010

Anhang: **7**

Probenbezeichnung: P 12				Int. Probennummer: M1007-05903-01					
Interne Standards									
Nr.	Name des Internen	Konzentration		Wiederfindung (%)		Bemerkungen			
a	Anilin d5	72,5		31					
b	Nitrobenzol d5	72,5		120					
c	Naphthalin d8	72,5		87					
d	1-Chlorododecan	72,5		72					
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
5119	33,56	13	– 53 d	206	164,178,251	unbekannt			
5136	33,66	65	– 259 d	136	122,236,281	unbekannt			
5254	34,31	16	– 63 d	59	44,55,72	unbekannt			
5340	34,79	51	– 205 d	274	57,71,245	unbekannt			
5357	34,88	17	– 70 d	56	55,57,73	unbekannt			
5525	35,81	6	– 26 d	99	57,71,113	unbekannt			Mit Sicherheit ein Alkylphosphate
6081	38,89	31	– 124 d	113	43,101,243	unbekannt			Zuckerähnlich
6125	39,14	20	– 80 d	113	43,101,243	unbekannt			Zuckerähnlich
6190	39,50	11	– 45 d	238	59,72,164	unbekannt			

Aufkonzentrierungsfaktor: 11
Bestimmungsgrenze in µg/l (Naphthalin d8): 2,30

Die Bestimmungsgrenze wurde anhand der von Prof. Dr. M. Oehme zusätzlich identifizierten Substanzen angepasst.

Rot und Kursiv: Kommentare von Prof. Dr. M. Oehme (Institut für Angewandte Analytische Chemie, Niederteufen, Schweiz)

Auftraggeber
Projekt
Auftrag Nr.
Datum

Harress Pickel Consult AG
DU II Kesslergrube, Grenzach Wyhlen
A10-01370
04.10.2010

Anhang: **8**

Probenbezeichnung: P 4										Int. Probennummer:		M1007-05904-01	
Interne Standards													
Nr.		Name des Internen				Konzentration		Wiederfindung (%)		Bemerkungen			
a		Anilin d5				1,1		33					
b		Nitrobenzol d5				1,1		99					
c		Naphthalin d8				1,1		102					
d		1-Chlorododecan				1,1		112					
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	
201	6,31	0,2	–	0,8	b	91		Benzene, 1-chloro-2-methyl-	88	95-49-8	oder isomer		
510	8,02	0,2	–	0,7	b	146		Benzene, 1,3-dichloro-	89	541-73-1	oder isomer		
548	8,23	0,3	–	1,3	b	146		Benzene, 1,4-dichloro-	89	106-46-7	oder isomer		
670	8,91	0,9	–	3,7	d	83	43,56,141	unbekannt			Ko-Elution von Dichlorbenzol (Scan 665) mit Unbekannt (Scan 669)		
846	9,88	0,1	–	0,5	b	106		Aniline, N-methyl-	88	100-61-8	oder isomer		
882	10,08	0,2	–	0,6	b	106		Aniline, N-methyl-	89	100-61-8	oder isomer		
990	10,68	2,8	–	11,1	d	81	67,79,82	unbekannt			Ein Alkylsubst. Cyclohexen oder Isomer		
1145	11,54	0,1	–	0,4	b	127		p-Chloranilin	83	106-47-8	oder Isomer		
1264	12,20	3,6	–	14,6	b	110		Phenol, 2-ethoxy-	91	94-71-3			
1472	13,35	0,2	–	0,8	b	121		Benzeneamine, 2,4-dimethyl-	86	95-68-1	oder Isomer		
1513	13,58	0,1	–	0,4	d	67	82,97,140	unbekannt					
1715	14,70	0,5	–	1,9	b	124		2-Ethoxy-4-methylphenol	86	2563-07-7			
1734	14,82	0,1	–	0,3	b	135		Benzeneamine, 2,4,6-trimethyl-	82	88-05-1	oder Isomer		
1810	15,23	0,2	–	0,9	d	148	43,57,91	unbekannt					
1838	15,38	0,6	–	2,4	b	135		Benzenamine, 2,4,6-trimethyl-	81	88-05-1			
1868	15,55	0,6	–	2,3	b	141		Benzenamine, 3-chloro-2-methyl-	90	87-60-5	oder isomer		
1899	15,72	0,6	–	2,4	b	141		Benzenamine, 4-chloro-2-methyl-	83	95-69-2	oder isomer		
1956	16,04	0,1	–	0,3	d	43	85,99,127	unbekannt					
2001	16,29	0,1	–	0,3	d	43	85,95	unbekannt			Kette mit mehrfachen O-Funktionen		
2032	16,46	0,3	–	1,3	b	161		Benzenamine, 3,5-dichloro-	88	626-43-7	oder isomer		
2097	16,82	0,3	–	1,1	d	134	106,144,179	unbekannt			Scan 2089 Teilstruktur Pyridin plus Acetatgruppe, Ko-Elution Scan 2094 unbekannt		
2264	17,74	0,1	–	0,2	b	77		Sulfone, methylphenyl-	83	3113-85-4			
2298	17,93	4,7	–	18,6	b	135		Phenol, 4-(1,1-dimethylpropyl)-	91	80-46-6			
2388	18,43	0,5	–	2,2	d	95	43,109,137	unbekannt			Ein Terpenoid		
2421	18,61	0,2	–	0,8	b	161		Benzenamine, 3,4-dichloro-	89	95-76-1	oder isomer		
2674	20,01	0,5	–	1,9	d	91	132,138,173	unbekannt					
2704	20,18	0,3	–	1,2	d	92	107,121,122	unbekannt					
2737	20,36	0,2	–	0,7	d	191	124,205,206	unbekannt			Ein sterisch gehindertes Phenol		
2797	20,70	2,3	–	9,1	c	143		1-Naphthalenamine	91	134-32-7			
2836	20,91	0,9	–	3,7	b	111		Benzene, 1-chloro-4-(methylsulfonyl)-	80	98-57-7			
2945	21,52	0,3	–	1,2	d	110	111,138,183	unbekannt					
3003	21,84	1,0	–	3,8	d	169	116,168,205	unbekannt			Teilsstruktur Biphenylamin oder isomer, Ko-Elution mit m/z 205 etc.		
3040	22,04	0,4	–	1,8	b	136		Pyrrole-3-carboxylic acid, 4-formyl-5-methyl-, ethyl ester	82	332414-41-2	oder isomer		
3062	22,16	1,4	–	5,7	d	245		(2,2,5,5-Tetramethyl-tetrahydro-1,3,4,6,8-pentaoxa-cyclopenta[a]inden-8a-yl)-methanol	92	NA			

Auftraggeber
Projekt
Auftrag Nr.
Datum

Harress Pickel Consult AG
DU II Kesslergrube, Grenzach Wyhlen
A10-01370
04.10.2010

Anhang: **8**

Probenbezeichnung: P 4				Int. Probennummer: M1007-05904-01				
Interne Standards								
Nr.	Name des Internen	Konzentration	Wiederfindung (%)		Bemerkungen			
a	Anilin d5	1,1	33					
b	Nitrobenzol d5	1,1	99					
c	Naphthalin d8	1,1	102					
d	1-Chlorododecan	1,1	112					
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
3070	22,21	0,9 – 3,6 d	143	43,101,287	unbekannt			Sehr ähnlich einen D-Mannitol-derivat (CAS3969-59-3), F/RF 79/81%
3176	22,80	3,3 – 13,2 b	91		Benzene, (1,1-diethylpropyl)-	82	4170-84-7	Homolog oder Isomer möglich
3262	23,27	0,5 – 2,2 b	91		Benzenesulfonamide, 4-methyl-	86	70-55-3	oder isomer
3282	23,38	0,4 – 1,6 d	43	99,128,155	unbekannt			
3302	23,49	0,4 – 1,5 d	144	103,130,169	unbekannt			
3335	23,68	0,3 – 1,3 d	43		2,2,7,7-Tetramethyl-tetrahydro-bis[1,3]dioxolo[4,5-b;4',5'-d]pyran-3a-carboxylic acid	87	NA	
3357	23,80	0,1 – 0,3 d	137	43,109,136	unbekannt			
3428	24,19	0,5 – 2,1 d	59	43,71,99	unbekannt			Zuckerähnlich
3455	24,34	0,2 – 0,6 d	131	43,72,73	unbekannt			
3538	24,80	0,1 – 0,4 d	134	43,138,223	unbekannt			
3565	24,95	0,1 – 0,5 b	91		Benzenesulfonamide, N,N-diethyl-4-methyl-	73	649-15-0	Plus Interferenz m/z 137 etc.
3604	25,17	0,1 – 0,4 d	150	43,149,195	unbekannt			
3639	25,36	2,4 – 9,8 b	141		Benzenesulfonamide, N-butyl-	86	3622-84-2	
3660	25,48	0,5 – 2,2 d	142	115,129,144	unbekannt			
3667	25,52	0,5 – 2,2 d	174	77,105,216	unbekannt			Acetylgruppe an Tetrahydronaphthalin plus Alkylgruppen, MW 216
3699	25,69	0,2 – 0,7 d	136	55,91,150	unbekannt			
3720	25,81	2,0 – 8,2 b	232		1-phenyl-3-methyl-4-hydroxy-4-(prop-2-yl)-2,5-dihydropyrazole-5-one (wiley9), F/RF 90/96%	90	NA	Wiley9
3757	26,02	0,4 – 1,6 d	246	173,201,217	unbekannt			
3843	26,49	1,1 – 4,5 d	136	154,182,183	unbekannt			
3904	26,83	2,9 – 11,5 b	149		Glutethimide		77-21-4	oder Homolog
3947	27,07	1,9 – 7,8 b	188		Antipyrine	90	60-80-0	
3998	27,35	0,1 – 0,3 d	235	43,190,205	unbekannt			
4036	27,56	7,1 – 28,4 d	202	56,77,110	unbekannt			Sehr wenig Information im MS, besteht aus Phenyl plus Teilstruktur 110 u plus Rest 15 u, Aromatisch, geradz. Anzahl N
4059	27,69	0,1 – 0,4 d	202	77,110,205	unbekannt			
4097	27,90	0,2 – 0,8 d	217	189,216,290	unbekannt			
4134	28,11	0,2 – 0,9 d	162	147,161,185	unbekannt			
4167	28,29	0,3 – 1,2 b	90		Benzenamine, 2-chloro-4-(methylsulfonyl)-	81	13244-35-4	
4183	28,38	2,9 – 11,5 b	215		Propylphenazone	78	NA	plus Ko-Elution Phthalat
4279	28,91	0,3 – 1,3 b	263		3,5-di-tert-Butyl-4-hydroxyphenylpropionic acid	82	20170-32-5	
4320	29,14	0,3 – 1,0 d	235	96,109,281	unbekannt			
4350	29,30	0,2 – 0,6 d	64		Cyclic octaatomic sulfur	80	10544-50-0	
4437	29,78	0,4 – 1,7 d	169	115,129,142	unbekannt			
4468	29,96	0,5 – 1,9 d	230	77,231,232	unbekannt			

Auftraggeber
Projekt
Auftrag Nr.
Datum

Harress Pickel Consult AG
DU II Kesslergrube, Grenzach Wyhlen
A10-01370
04.10.2010

Anhang: **8**

Probenbezeichnung: P 4				Int. Probennummer:		M1007-05904-01		
Interne Standards								
Nr.	Name des Internen	Konzentration	Wiederfindung (%)		Bemerkungen			
a	Anilin d5	1,1	33					
b	Nitrobenzol d5	1,1	99					
c	Naphthalin d8	1,1	102					
d	1-Chlorododecan	1,1	112					
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
4470	29,97	0,5 – 2,2 b	230		Methanone, (2-amino-5-chlorophenyl)phenyl-	85	719-59-5	Interferenz durch Scan 4464
4496	30,11	0,1 – 0,5 d	59	43,71,97	unbekannt			
4614	30,77	0,1 – 0,3 d	43	97,285,287	unbekannt			
4682	31,14	0,1 – 0,5 d	144	103,130,145	unbekannt			
4761	31,58	0,3 – 1,0 d	91	119,135,162	unbekannt			
4783	31,70	0,1 – 0,3 d	260	204,231,232	unbekannt			Gehört zur Substanzgruppe "Fragment 204", kommt auch in anderen Deponien vor, sep. Bericht vorhanden
4811	31,86	0,1 – 0,5 d	204	67,232,274	unbekannt			Gehört zur Substanzgruppe "Fragment 204", kommt auch in anderen Deponien vor, sep. Bericht vorhanden
4914	32,43	0,5 – 2,2 b	159		Benzene, 1,1'-sulfonylbis[4-chloro-	86	80-07-9	
4926	32,49	0,2 – 0,9 d	255	137,148,202	unbekannt			
4971	32,74	0,4 – 1,7 d	112	70,92,93	unbekannt			
5147	33,72	1,5 – 6,1 d	136	122,236,281	unbekannt			
5183	33,92	0,1 – 0,3 d	193	194,293,323	unbekannt			
5254	34,31	0,3 – 1,1 d	59	43,55,72	unbekannt			
5338	34,78	0,1 – 0,4 d	71	43,57,85	unbekannt			Ein Alkan
5359	34,89	0,9 – 3,5 d	193	194,239,323	unbekannt			
5526	35,82	0,2 – 0,8 d	99		Phosphoric acid, tris(2-ethylhexyl) ester	89	78-42-2	oder Isomer/Homolog
5628	36,38	0,7 – 2,8 b	277		Triphenylphosphine oxide	90	791-28-6	
5791	37,29	0,1 – 0,4 c	286		[1,1'-Binaphthalene]-2,2'-diol	78	602-09-5	Sehr wahrscheinlich
5854	37,64	0,7 – 2,9 b	255		1,1'-Biisoquinoline	81	17999-93-8	
6081	38,89	0,5 – 1,9 d	113	43,101,243	unbekannt			Zuckerähnlich
6125	39,14	0,4 – 1,6 d	113	43,101,243	unbekannt			Zuckerähnlich

Aufkonzentrierungsfaktor:

629

Bestimmungsgrenze in µg/l (Naphthalin d8):

0,07

Die Bestimmungsgrenze wurde anhand der von Prof. Dr. M. Oehme zusätzlich identifizierten Substanzen angepasst.

Rot und Kursiv: Kommentare von Prof. Dr. M. Oehme (Institut für Angewandte Analytische Chemie, Niederteufen, Schweiz)