

AAC

INSTITUT FÜR ANGEWANDTE ANALYTISCHE CHEMIE
PROF. DR. MICHAEL OEHME

WEITERBILDUNG UND BERATUNG IN ANALYTISCHER CHEMIE

Herrn Martin Steckermeier
HPC HARRESS PICKEL CONSULT
AG
Nansenstraße 5
DE-79539 Lörrach

IHRE REF. :

UNSERE REF. :
2010-1044

NIEDERTEUFEN AR
28. März 2010

Durchsicht und Interpretation Screenings Kesslergrube Januar 2010, Teil 1

Sehr geehrter Herr Steckermeier,

anbei sende ich Ihnen meine Evaluierung der ersten 16 Proben. Um die Kontrolle effizienter zu gestalten und um die Zeit für einen detaillierten separaten Bericht zu sparen, habe ich in die Exceltabellen meine Kommentare direkt in der letzten Spalte angefügt. Ausserdem habe ich kleine Fehler wie falsche Basisierungen angemerkt. Die flächenäquivalenten Konzentrationen habe ich aus Zeitgründen nicht kontrolliert. Mir sind aber ein seltenes Mal Verbindungen aufgefallen, welche an Hand der Signalhöhe über der Grenze von 0,05-0,1 ng/l liegen könnten (z.B. Scan 3430 in Probe 1623, Scan 714,3804,6038 in Probe 1646). Eine erneute Überprüfung lohnt sich aber nicht.

Die Wiederfindungen der Extraktionsstandards Anilin-d5 (ca. 20-30%) und 1-Chlordodekan (20-83%) sind teilweise sehr niedrig. Das ist „normal“ für den ersteren (polare Substanz), während eine Erklärung für die zweite fehlt. Ich vermute eine Störung auf diesem internen Standard, was im Schlussbericht angegeben werden sollte.

Bei einigen Proben sind die Substanzen nicht gemäss Scannummer sortiert. Bitte dies noch nachholen. Ausserdem fehlen in den Proben 1624 und 1644 die Hauptmassen.

Zusätzlich habe ich folgende summarische Kommentare zum Vorliegen weiterer Substanzen im Konzentrationsbereich <0,05 µg/l in niedrig belasteten Proben (Kategorie 0-1 nach BMG):

ADRESSE :
AAC
BÖHL 508
CH-9052 NIEDERTEUFEN
SCHWEIZ

TEL :
FAX :
GSM :
E-MAIL :
INT : +41-71-333 1 800
INT : +41-71-333 01 801
INT : +41-79-358 20 10
MICHAEL.OEHME@UNIBAS.CH

BANK : BASELSTADTLICHE
KANTONSBANK, BASELSTADT
SWIFT : BKSBCH33
IBAN : CH75 0076 9016 2247 8050
2

Die dabei verwendeten Abkürzungen sind wie folgt:

MW: Molekülmasse

BP: Basision („base peak“)

F/RF: Übereinstimmung mit der Datenbank (F = „Fit“, RF = Retrofit)

m/z: Masse-zu-Ladung

i: Interferenz

- **Probe 01622 CI 32:** Es wurden Substanzen $<0.05 \mu\text{g/l}$ gefunden. Diese kommen aber entweder schon in der Blindprobe vor oder sind fast ausschliesslich biogenen Ursprungs.
- **Probe 01615 CI 37:** Es wurden Substanzen $<0.05 \mu\text{g/l}$ gefunden. Diese kommen aber entweder schon in der Blindprobe vor oder sind fast ausschliesslich biogenen Ursprungs.
- **Probe 01613 CI34:** Es wurden Substanzen $<0.05 \mu\text{g/l}$ gefunden. Diese kommen aber entweder schon in der Blindprobe vor oder sind fast ausschliesslich biogenen Ursprungs.
- **Probe 01624 CI 35:** Es wurden Substanzen $<0.05 \mu\text{g/l}$ gefunden. Diese kommen aber entweder schon in der Blindprobe vor oder sind mehrheitlich biogenen Ursprungs. Es wurden allerdings auch Spuren von chemierelevanten Verbindungen nachgewiesen wie chlorierte Aniline.
- **Probe 01625 CI 31:** Es wurden Substanzen $<0.05 \mu\text{g/l}$ gefunden. Diese kommen aber entweder schon in der Blindprobe vor oder sind mehrheitlich biogenen Ursprungs.
- **Probe 01638 P 8:** Es wurden Substanzen $<0.05 \mu\text{g/l}$ gefunden. Diese kommen aber entweder schon in der Blindprobe vor oder sind biogenen Ursprungs.
- **Probe 01636 P7:** Es wurden Substanzen $<0.05 \mu\text{g/l}$ gefunden. Diese kommen aber entweder schon in der Blindprobe vor oder sind mehrheitlich anthropogenen Ursprungs wie chlorierte Aniline, Chlorbutadiene etc.
- **Probe 01623 P 13:** Es wurden Substanzen $<0.05 \mu\text{g/l}$ gefunden. Diese kommen aber entweder schon in der Blindprobe vor oder sind biogenen Ursprungs.
- **Probe 01629 Br49:** Es wurden Substanzen $<0.05 \mu\text{g/l}$ gefunden. Diese kommen aber entweder schon in der Blindprobe vor oder sind biogenen Ursprungs.
- **Probe 01619 Blind 1:** Es wurden Substanzen $<0.05 \mu\text{g/l}$ gefunden. Diese kommen auch in der zugeordneten Methodenblindprobe vor und stammen aus dem allgemeinen, unvermeidbaren Kontaminationshintergrund des Labors (Glasgeräte, Flaschenverschluss, Laborgeräthintergrund etc.), der je nach Vorgeschichte variiert.
- **Probe 01651 P 15:** Es wurden Substanzen $<0.05 \mu\text{g/l}$ gefunden. Diese kommen aber auch schon in der Blindprobe vor.
- **Probe 01637 KE 34:** Es wurden Substanzen $<0.05 \mu\text{g/l}$ gefunden. Diese kommen aber entweder schon in der Blindprobe vor oder sind mehrheitlich biogenen Ursprungs.
- **Probe 01649 CI 33:** Es wurden Substanzen $<0.05 \mu\text{g/l}$ gefunden. Diese kommen aber entweder schon in der Blindprobe vor oder sind mehrheitlich biogenen Ursprungs.
- **Probe 01646 CI 36:** Es wurden Substanzen $<0.05 \mu\text{g/l}$ gefunden. Diese kommen aber entweder schon in der Blindprobe vor oder sind mehrheitlich biogenen Ursprungs. Es wurden allerdings auch Spuren von chemierelevanten Verbindungen nachgewiesen wie Dichlorbenzol.

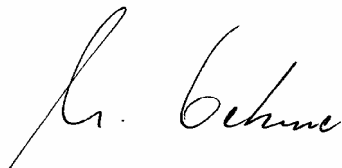
Die stark belastete Probe **1930 KE42** enthielt eine Vielzahl von unbekannten Massenspektren, die entweder sehr informationsarm oder komplex waren und nicht interpretiert werden konnten. Sie unterscheidet sich signifikant von allen bisherigen in Screenings



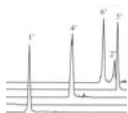
untersuchten Deponieproben. Zudem enthielt sie einen Teil terpenähnliche/terpenoide Substanzen.

Bitte beachten Sie wiederum, dass alle Identifikationen tentativ sind, solange diese nicht mit Referenzverbindungen bestätigt worden sind.

Für Fragen und Präzisierungen stehe ich wie immer gerne zur Verfügung.



Prof. Dr. M. Oehme



AAC

INSTITUT FÜR ANGEWANDTE ANALYTISCHE CHEMIE
 PROF. DR. MICHAEL OEHME

WEITERBILDUNG UND BERATUNG IN ANALYTISCHER CHEMIE

Herrn Martin Steckermeier
 HPC HARRESS PICKEL CONSULT
 AG
 Nansenstraße 5
DE-79539 Lörrach

IHRE REF.:

UNSERE REF.:
 2010-1044

NIEDERTEUFEN AR
 5. April 2010

Durchsicht und Interpretation Screenings Kesslergrube Januar 2010, Teil 2

Sehr geehrter Herr Steckermeier,

anbei sende ich Ihnen meine Evaluierung der ersten 16 Proben. Um die Kontrolle effizienter zu gestalten und um die Zeit für einen detaillierten separaten Bericht zu sparen, habe ich in die Exceltabellen meine Kommentare direkt in der letzten Spalte angefügt. Die flächenäquivalenten Konzentrationen habe ich aus Zeitgründen nicht kontrolliert. Mir sind aber gelegentlich Verbindungen aufgefallen, welche an Hand der Signalhöhe über der Grenze von 0,05-0,1 µg/l bzw. 0,2 µg/l liegen könnten. Ich habe diese angemerkt. Bei den nicht identifizierbaren Verbindungen handelt es sich teilweise um Massenspektren, die durch Ko-Elutionen gestört sind. Bei anderen Unbekannten könnte man mit einem grösseren Zeitaufwand (ca. 10-30 min pro Substanz) sicher etwas zur Struktur sagen, was aber wegen der grossen Anzahl von Proben und Substanzen zur Zeit unrealistisch ist.

Ich habe die niedrig belasteten Proben sehr genau mit den dazu gehörigen Blindproben verglichen und in der Auswertetabelle angemerkt, ob Verbindungen im Bereich 0,02-0,05 µg/l vorhanden sind.

Die Wiederfindungen für 1-Chlordodekan liegen teilweise über 100%, was auf eine Störung hindeutet. Dies sollte im Schlussbericht angegeben werden.

Die Hauptmassen müssen in der entsprechenden Spalte noch nachgetragen werden.

Die verwendeten Abkürzungen sind wie folgt:

MS: Massenspektrum

MW: Molekülmasse

BP: Basision („base peak“)

F/RF: Übereinstimmung mit der Datenbank (F = „Fit“, RF = Retrofit)

m/z: Masse-zu-Ladung

i: Interferenz

ADRESSE:
 AAC
 BÖHL 508
 CH-9052 NIEDERTEUFEN
 SCHWEIZ

TEL: INT: +41-71-333 1 800
 FAX: INT: +41-71-333 01 801
 GSM: INT: +41-79-358 20 10
 E-MAIL: MICHAEL.OEHME@UNIBAS.CH

BANK: BASELSTADTLICHE
 KANTONALBANK, ARLESHEIM
 SWIFT: BLKBCH22
 IBAN: CH75 0076 9016 2247 8050
 2



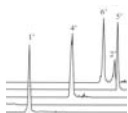
AAC

PAGE/SEITE 2

Bitte beachten Sie wiederum, dass alle Identifikationen tentativ sind, solange diese nicht mit Referenzverbindungen bestätigt worden sind.

Für Fragen und Präzisierungen stehe ich wie immer gerne zur Verfügung.

Prof. Dr. M. Oehme



AAC

INSTITUT FÜR ANGEWANDTE ANALYTISCHE CHEMIE
PROF. DR. MICHAEL OEHME

WEITERBILDUNG UND BERATUNG IN ANALYTISCHER CHEMIE

Herrn Martin Steckermeier
HPC HARRESS PICKEL CONSULT
AG
Nansenstraße 5
DE-79539 Lörrach

IHRE REF.:

UNSERE REF.:
2010-1044

NIEDERTEUFEN AR
22. Juli 2010

Durchsicht und Interpretation Screenings Kesslergrube Juni 2010

Sehr geehrter Herr Steckermeier,

anbei sende ich Ihnen meine Evaluierung der 6 Screeningproben vom Juni 2010. Ich habe dabei in den Proben CI36 (M1006-04792-01) und P7 (M1006-04791-01) weitere Verbindungen gefunden, die deponierelevant sind. Diese sind zusätzlich aufgeführt, wobei die entsprechenden flächenäquivalenten Konzentrationen noch einzusetzen sind. Im Gegensatz dazu konnte ich trotz intensiver manueller Kontrolle einige Verbindungen nicht finden. Diese müssten dann noch gestrichen werden. Die Blindprobe 13 habe ich sehr genau mit der dazu gehörigen Laborblindprobe verglichen und keine weiteren Verbindungen im Bereich $>0,05 \mu\text{g/l}$ gefunden.

Die verwendeten Abkürzungen sind wiederum wie folgt:

MS: Massenspektrum

MW: Molekülmasse

BP: Basision („base peak“)

F/RF: Übereinstimmung mit der Datenbank (F = „Fit“, RF = Retrofit)

m/z: Masse-zu-Ladung

i: Interferenz

Die Wiederfindungen für Anilin sind wiederum methodenbedingt $<50\%$. Alle anderen Wiederfindungen sind in Ordnung.

Bitte beachten Sie wiederum, dass alle Identifikationen tentativ sind, solange diese nicht mit Referenzverbindungen bestätigt worden sind.

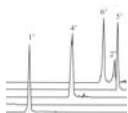
Für Fragen und Präzisierungen stehe ich wie immer gerne zur Verfügung.

Prof. Dr. M. Oehme

ADRESSE:
AAC
BÖHL 508
CH-9052 NIEDERTEUFEN
SCHWEIZ

TEL: INT: +41-71-333 1 800
FAX: INT: +41-71-333 01 801
GSM: INT: +41-79-358 20 10
E-MAIL: MICHAEL.OEHME@UNIBAS.CH

BANK: BASELSTADTLICHE
KANTONSBANK, BASELSTADT
SWIFT: BKSBCH33
IBAN: CH75 0076 9016 2247 8050
2



AAC

INSTITUT FÜR ANGEWANDTE ANALYTISCHE CHEMIE
 PROF. DR. MICHAEL OEHME

WEITERBILDUNG UND BERATUNG IN ANALYTISCHER CHEMIE

Herrn Martin Steckermeier
 HPC HARRESS PICKEL CONSULT
 AG
 Nansenstraße 5
DE-79539 Lörrach

IHRE REF.:

UNSERE REF.:
 2010-1044

NIEDERTEUFEN AR
 12. August 2010

Durchsicht und Interpretation Screenings Kesslergrube Laufnummer BMG 5223-5229, 5391-5393, 5396-5397 und 5742-5748, total 19 Proben

Sehr geehrter Herr Steckermeier,

anbei sende ich Ihnen meine Evaluierung der obigen 19 Proben. Ich habe wiederum in die Exceltabellen meine Kommentare direkt in der letzten Spalte angefügt.

Die Zusammenfassung von unbekannten Verbindungen als Summe durch BMG macht zwar Sinn, erschwert aber die Nachkontrolle. Zudem ist die Unterscheidung zwischen Unbekannten in der Summe oder einzeln aufgeführt, nicht immer mengenkonsistent. Ausserdem ergaben sich Unterschiede in der Übereinstimmung mit Bibliotheksspektren. Dabei wurden Verbindungen <80% zwar gemäss Vorgabe formell korrekt von BMG als „Unbekannt“ eingestuft, was aber dazu führte, dass Verbindungen, deren Massenspektren geringfügig gestört sind, nachträglich als identifiziert aufgeführt werden mussten. Die Auswertung war zudem teilweise nicht ganz nachzuvollziehen, was zusätzlich Zeit gekostet hat. Ich habe daher beispielhaft bei der Probe 5743 detaillierte Anmerkungen gemacht, die zeigen wo Abweichungen vorlagen. Es fehlte z.B. das deutliche Signal bei Scan 2104 in jeglicher Liste. Ich habe deshalb fortlaufend das kontrolliert, was ich sehe und dann mit den Listen verglichen. Damit sind die Proben praktisch zweimal komplett durchgesehen worden. In Zukunft müssen wir bei solchen Proben, die viele Ko-Elutionen und einen hohen Hintergrund haben, anders vorgehen, sonst kostet das zu viel Zeit. Zum Glück ist dies spezifisch für die Kesslergrube.

Die flächenäquivalenten Konzentrationen habe ich aus Zeitgründen nicht kontrolliert. Bei den nicht identifizierbaren Verbindungen handelt es sich wiederum teilweise um Massenspektren, die durch Ko-Elutionen gestört sind und kaum zu interpretieren sind. Bei anderen Unbekannten könnte man mit einem grösseren Zeitaufwand (ca. 10-30 min pro Substanz) sicher etwas zur Struktur sagen, was aber wegen der grossen Anzahl von Proben und Substanzen nur nachträglich in Einzelfällen sinnvoll wäre.

ADRESSE:
 AAC
 BÖHL 508
 CH-9052 NIEDERTEUFEN
 SCHWEIZ

TEL: INT: +41-71-333 1 800
 FAX: INT: +41-71-333 01 801
 GSM: INT: +41-79-358 20 10
 E-MAIL: MICHAEL.OEHME@UNIBAS.CH

BANK: BASELSTADTLICHE
 KANTONALBANK, ARLESHEIM
 SWIFT: BLKBCH22
 IBAN: CH75 0076 9016 2247 8050
 2



Die Wiederfindungen für Anilin sind methodenbedingt <50%, diejenigen für die anderen internen Standards sind in Ordnung.

Die Quantifizierung in Bezug auf die internen Standards muss nochmals durchgesehen und teilweise korrigiert werden. So wurde z.B. 2-Ethoxyphenol in Probe 5745 mit internem Standard b und in Probe 5392 mit internem Standard d quantifiziert. Das gleiche Problem taucht auch bei 1-Naphthylamin und anderen Substanzen auf.

Die verwendeten Abkürzungen sind wiederum wie folgt:

MS: Massenspektrum

MW: Molekülmasse

BP: Basision („base peak“)

F/RF: Übereinstimmung mit der Datenbank (F = „Fit“, RF = Retrofit)

m/z: Masse-zu-Ladung

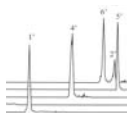
i: Interferenz

Bitte beachten Sie wiederum, dass alle Identifikationen tentativ sind, solange diese nicht mit Referenzverbindungen bestätigt worden sind.

Für Fragen und Präzisierungen stehe ich wie immer gerne zur Verfügung.

A handwritten signature in black ink, appearing to read 'M. Oehme', written in a cursive style.

Prof. Dr. M. Oehme



AAC

INSTITUT FÜR ANGEWANDTE ANALYTISCHE CHEMIE
 PROF. DR. MICHAEL OEHME

WEITERBILDUNG UND BERATUNG IN ANALYTISCHER CHEMIE

Herrn Martin Steckermeier
 HPC HARRESS PICKEL CONSULT
 AG
 Nansenstraße 5
DE-79539 Lörrach

IHRE REF.:

UNSERE REF.:
 2010-1044

NIEDERTEUFEN AR
 29. August 2010

Durchsicht und Interpretation Screenings Kesslergrube Laufnummer BMG 5825, 5827, 5898-5899 und 5902-5904, total 7 Proben

Sehr geehrter Herr Steckermeier,

anbei sende ich Ihnen meine Evaluierung der obigen 7 Proben. Ich habe wiederum in die Exceltabellen meine Kommentare direkt in der letzten Spalte angefügt. Zudem habe ich zusätzlich identifizierte, bzw. gefundene Verbindungen aufgeführt und wie folgt markiert: Gelb: In keiner der aufgeführten Listen gefunden; Grün: In „Liste ausgewählt“ als „Unbekannt“ vorhanden.

Ausserdem habe ich festgestellt, dass die meisten Proben inklusive die Laborblindprobe eine spät eluierende Serie an homologen Kohlenwasserstoffen enthält. Diese stören zwar das Screening nicht, sind aber ein Hinweis auf eine eingeschleppte Kontamination. Das letzte Mal, wo ich dies beobachtet habe, wurde dieses Muster durch die Deckeldichtungen der Probengläschen verursacht. Der Hersteller hatte ohne Rückmeldung den Produktionsprozess verändert, und danach tauchten diese Geistersignale auf. Vielleicht hilft dies BMG weiter, die Ursache der Kontamination zu finden.

Die flächenäquivalenten Konzentrationen habe ich aus Zeitgründen nicht kontrolliert. Bei den nicht identifizierbaren Verbindungen handelt es sich wiederum teilweise um Massenspektren, die durch Ko-Elutionen gestört sind und kaum zu interpretieren sind. Bei anderen Unbekannten könnte man mit einem grösseren Zeitaufwand (ca. 10-30 min pro Substanz) sicher etwas zur Struktur sagen, was aber wegen der grossen Anzahl von Proben und Substanzen nur nachträglich in Einzelfällen sinnvoll wäre.

Die Wiederfindungen für Anilin sind methodenbedingt <50%, diejenigen für die anderen internen Standards sind in grösstenteils in Ordnung. Bei den Proben 5903 und 5904 liegen einige Werte deutlich über 100%, was auf Störungen durch Matrixeffekte hinweist. Die Mengenabschätzungen sind daher unsicherer als bei den anderen Proben.

ADRESSE:
 AAC
 BÖHL 508
 CH-9052 NIEDERTEUFEN
 SCHWEIZ

TEL: INT: +41-71-333 1 800
 FAX: INT: +41-71-333 01 801
 GSM: INT: +41-79-358 20 10
 E-MAIL: MICHAEL.OEHME@UNIBAS.CH

BANK: BASELSTADTLICHE
 KANTONALBANK, ARLESHEIM
 SWIFT: BLKBCH22
 IBAN: CH75 0076 9016 2247 8050
 2

Die verwendeten Abkürzungen sind wiederum wie folgt:

MS: Massenspektrum

MW: Molekülmasse

BP: Basision („base peak“)

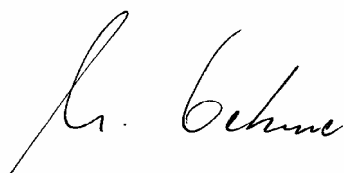
F/RF: Übereinstimmung mit der Datenbank (F = „Fit“, RF = Retrofit)

m/z: Masse-zu-Ladung

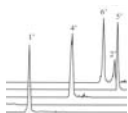
i: Interferenz

Bitte beachten Sie wiederum, dass alle Identifikationen tentativ sind, solange diese nicht mit Referenzverbindungen bestätigt worden sind.

Für Fragen und Präzisierungen stehe ich wie immer gerne zur Verfügung.



Prof. Dr. M. Oehme



AAC

INSTITUT FÜR ANGEWANDTE ANALYTISCHE CHEMIE
PROF. DR. MICHAEL OEHME

WEITERBILDUNG UND BERATUNG IN ANALYTISCHER CHEMIE

Herrn Martin Steckermeier
HPC HARRESS PICKEL CONSULT
AG
Nansenstraße 5
DE-79539 Lörrach

IHRE REF.:

UNSERE REF.:
2010-1044

NIEDERTEUFEN AR
30. August 2010

Kommentare korrigierte Screeningberichte Kesslergrube 5391-5397 und 5742-5748

Sehr geehrter Herr Steckermeier,

ich habe bei den von BMG korrigierten Screeningberichten nur die von mir detailliert kommentierte Probe 5743 angesehen. Dabei habe ich festgestellt, dass wiederum wesentliche Kommentare nicht übernommen wurden. Ich habe dann versucht den Grund dafür herauszufinden:

Unbestritten ist, dass durch den hohen chemischen Hintergrund die angestrebte Bestimmungsgrenze von 0,05 µg/l nicht zu erreichen war. Man muss daher versuchen, das zu identifizieren, was machbar ist. Hier hat offenbar BMG eine sehr formalistische Auswertung gewählt. Mit Hilfe des internen Standard Naphthalin-D8 wurde eine Bestimmungsgrenze von 4 µg/l festgelegt. Das entsprechende Signal von Naphthalin-D8 bei Scan 1386 entspricht im Chromatogramm ca. 14 µg/l bei einem Signal-zu-Rauschen von ca. 70:1. Bestimmungsgrenzen werden normalerweise bei einem Rauschen von 10 :1 festgelegt, was dann 2 µg/l entsprechen würde. Wie BMG auf 4 µg/l kommt, ist mir unklar. Zudem ist dieser Wert ja eine reine Orientierung. Man sollte unabhängig davon das ansehen, was noch massenspektrometrisch machbar ist bzw. ein gut sichtbares Signal im Gaschromatogramm ergibt.

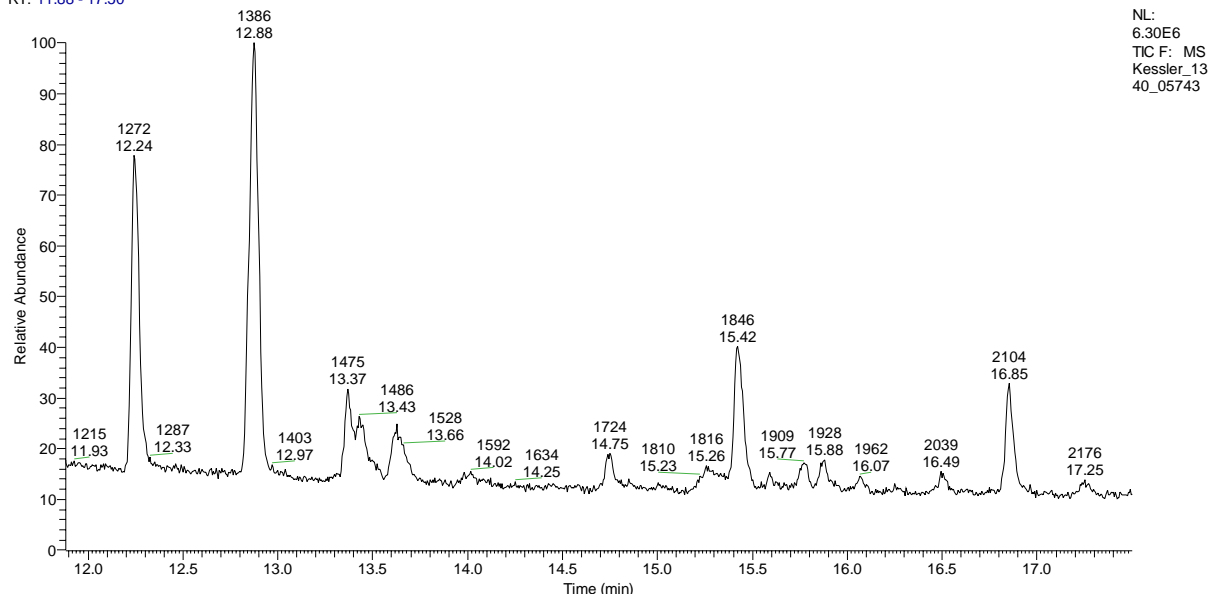
ADRESSE:
AAC
BÖHL 508
CH-9052 NIEDERTEUFEN
SCHWEIZ

TEL: INT: +41-71-333 1 800
FAX: INT: +41-71-333 01 801
GSM: INT: +41-79-358 20 10
E-MAIL: MICHAEL.OEHME@UNIBAS.CH

BANK: BASELSTADTLICHE
KANTONSBANK, BASELSTADT
SWIFT: BKSBCH33
IBAN: CH75 0076 9016 2247 8050
2



RT: 11.88 - 17.50



Scan 1846 ist abgeschätzt gerade 4 µg/l, Scan 2104 etwas weniger. Er wurde aus obigen formalistischen Gründen wiederum nicht berücksichtigt. Er konnte von mir nicht identifiziert werden und hätte, da gut als Signal definiert (Signal-zu-Rauschen immer noch ca. 20:1), daher in die Summe der Unbekannte eingerechnet werden sollen. Das ist wiederum nicht geschehen.

Scan 1475 konnte von mir eindeutig als ein Dimethylanilin identifiziert werden (nicht 3,4-Dimethylanilin, Isomere sind auch möglich). Das Massenspektrum erfüllte auch problemlos das Kriterium, dass das Basision eine Signal-zu-Rauschen >10:1 sein muss. Diese Verbindung wurde aufgeführt. Die Anmerkung „<Bestimmungsgrenze“ sollte aber gestrichen werden. Auch Scan 1724 war zu identifizieren mit guter Übereinstimmung mit dem Bibliotheksspektrum (siehe mein Kommentar in der Exceltabelle). Diese Verbindung fehlt jedoch immer noch. Auf weitere Beispiele verzichte ich.

Ein weiteres Problem ist auch dadurch entstanden, dass man bei einer Übereinstimmung <80% konsequent die Verbindung als unbekannt definiert hat. Das ist zwar formell richtig, sollte aber mit einem gesunden Pragmatismus interpretiert werden, da durch unterschiedliche manuelle Subtraktionen des Hintergrunds die Grenze überschritten werden kann bzw. die Identifizierung auch bei niedrigerer Übereinstimmung trotzdem richtig ist.

Summa summarum, das Vorgehen von BMG konnte nicht alle Verbindungen nachweisen, die möglich gewesen wären. Meine Nachinterpretation hat diese Lücke bei den identifizierbaren Substanzen (inklusive solche bei denen Teilstrukturen sichtbar sind) so weit geschlossen. Bei den weiterhin Unbekannten habe ich nicht alle kleinen Signale angemerkt, da dies die Summe der Unbekannten nicht wesentlich (<10%) beeinflusst.

Um die Sache zeiteffizient abzuschliessen schlage ich vor, dass BMG ohne wenn und aber meine Anmerkungen 1:1 übernimmt. Die Verantwortung dafür liegt bei mir und nicht bei BMG.



Die Summe der Unbekannten sollte zudem durch die von mir zusätzlich gefundenen Verbindungen angepasst werden, wobei dann die untere Grenze der niedrigsten abgeschätzten Konzentration entspricht.

Ich hoffe, dass dies das Problem löst.
Mit freundlichen Grüßen!

Für Fragen und Präzisierungen stehe ich wie immer gerne zur Verfügung.

A handwritten signature in black ink, appearing to read 'M. Oehme', written in a cursive style.

Prof. Dr. M. Oehme