

1188-1197 DIB, Bonfol, screening-Komm-MOe.xls

Résultats d'analyses: DIB, Bonfol, sortie STEP - Ligne 2							Date d'analyse: 15.09.2010	Méthode: MON ME CHRO 004*
1188 / 10	RT	Area	ng/l	% ID	MW	Formula	Name	Commentaire: Prof. M. Oehme
Scan #			(Area)	Fit				
399	5.15	68'593'200	36	753	128	C8H16O	Inconnu	An unsaturated alcohol, biogenic origin
527	5.84	48'634'363	26	734			Inconnu	An alcohol, biogenic origin?
682	6.67	21'220'078	11	839	106	C8H10	Ethylbenzene	Ok, but also present in blank, QS criterion ok?
848	7.56	68'846'719	36	841	98	C6H10O	Cyclopentanone, 2-methyl-	Rather cyclohexanone, probably biogenic origin
983	8.29	95'777'791	50	831	108	C6H4O2	p-Benzoquinone	Ok origin?
1174	9.32	93'032'028	49	872	106	C7H6O	Benzaldehyde	Ok, both biogenic and anthropogenic origin
1241	9.68	447'128'652	235	810	242	C14H18N2Si	Silanediamine 1,1-dimethyl-N,N'-diphenyl	No, simply aniline, MW 93, anthropogenic
1438	10.74	233'142'796	123	865	122	C7H6O2	p-Benzoquinone, 2-methyl	Ok, origin?
1707	12.19	133'672'933	70	839	107	C7H9N	Benzamine, 3-methyl	Ok, or isomer, anthropogenic
1885	13.14	376'588'739	198	881	136	C8H8O2	2,5-Cyclohexadiene-1,4-dione,2,5-dimethyl-	Ok, or isomer, probably anthropogenic
1950	13.49	66'537'249	35	758	138	C9H14O	2-Cyclohexen-1-one, 3,5,5-trimethyl	Possible. Trade name Isophoron, solvent Degussa, anthropogenic
1974	13.62	34'820'398	18	821	127	C6H6ClN	Aniline 2-chloro	Ok, or isomer, anthropogenic
2408	15.96	45'415'333	24	715			Inconnu	Cinnamaldehyde or isomer, terpenoid, biogenic
2427	16.06	29'489'865	16	722			Inconnu	Not identifiable
2578	16.87	41'441'819	22	823	135	C9H13N	Benzamine, 2,4,6-trimethyl-	Ok, or isomer
2889	18.54	60'576'533	32	843	161	C6H5Cl2N	Aniline 2,6-dichloro	Ok, or isomer
3285	20.68	233'652'067	123	640			Inconnu	Not identifiable
4485							3,5-di-tert-Butyl-4-hydroxybenzyl alcohol	Additionally found, very low conc. In blank, F/RF 779/785
4718	28.39	30'574'579	16	573			Inconnu	Not identifiable, also present at other chemical dump sites
5130	30.6	493'393'191	260	870	256	C16H32O2	n-Hexadecanoic acid	Ok
5187	30.91	54'465'740	29	686			Inconnu	Prob. benzoic acid, 3,5-bis(1,1-dimethylethyl)-4-hydroxy-, ethyl ester, a polymer additive, plus interference
5258	31.29	36'199'875	19	757	310	C22H46	Docosane	Or homologue
5715	33.75	155'747'770	82	759	284	C18H36O2	Octadecanoic acid	Ok
5970	35.12	25'989'211	14	563			Inconnu	Contains a C4H10N-group as charge site, rest has no charge stabilisation, prob. Biogenic
7332	42.45	129'372'254	68	754	410	C30H50	2,6,10,14,18,22-Tetracosahexaene, 2,6,10,15,19,23-hexamethyl-, (alle E)-	Ok, Squalene, biogenic
7668	44.26	37'908'482	20	615			Inconnu	Contains a C4H10N-group as charge site, rest has no charge stabilisation, prob. Biogenic
7967	45.87	64'527'503	34	782	386	C27H46O	17-(1,5-Dimethylhexyl)-10,13-dimethyl-2,3,4,7,8,9,10,11,12,13,14,15,16,17-tetradecahydro-1H-cyclopenta(a)phenanthren-3-ol	Ok, Cholestenol, biogenic
8224	47.25	33'571'961	18	561			Inconnu	Possibly a long-chained glycoether, origin chemical and waste water
8297	47.64	44'496'047	23	757	412	C29H48O	Stigmasta-5,22-dien-3-ol	Ok, cholestadienol derivative, biogenic

La ou les méthodes marquées * n'entrent pas actuellement dans le champ de l'accréditation
 La ou les méthodes marquées ** ont été effectuées en sous-traitance
 Les informations relatives à l'analyse peuvent être obtenues sur demande
 Toute reproduction partielle ou modification du document doit être approuvée par le laboratoire
 Les résultats ne concernent que le ou les échantillons analysés



Date: 22.01.2011 Visa laboratoire: √ VS Visa chimiste: √ JJR

1188-1197 DIB, Bonfol, screening-Komm-MOe.xls

Résultats d'analyses: DIB, Bonfol, piézomètre SG 15							Date d'analyse: 15.09.2010	Méthode: MON ME CHRO 004*
1189 / 10	Area	ng/l	% ID	MW	Formula	Name	Commentaire: Prof. M. Oehme	
Scan #	RT	(Area)	Fit					
342	4.84	58'372'567	23	731		Inconnu	An aliphatic acid, biogenic	
402	5.16	21'403'107	9	715		Inconnu	Ok	
780	7.2	108'080'942	43	862	102	C5H10O2	Pentanoic acid Ok, or homologue, biogenic	
903	7.86	35'530'847	14	853	118	C6H14O2	Ethanol, 2-butoxy- Ok, used as solvent, not necessarily from waste site	
977	8.26	41'800'268	17	632		Inconnu	Probably dichloroacetaldehyde, difficult background subtr.	
1276	9.87	417'735'104	167	855	116	C6H12O2	Hexanoic acid Ok, or homologue, biogenic	
1432	10.71	66'549'155	27	700		Inconnu	A chained (branched) alcohol, prob. Biogenic	
4490	27.16	358'216'594	143	861	228	C14H28O2	Tetradecanoic acid Ok, biogenic	
5136	30.64	1'583'299'181	632	853	256	C16H32O2	n-Hexadecanoic acid Ok, biogenic	
5386	31.98	90'892'872	36	626		Inconnu	Co-elution of two compounds, not identifiable, but prob. Biogenic	
5396	32.03	58'499'686	23	697		Inconnu	Co-elution of two compounds, not identifiable, but prob. Biogenic	
5718	33.77	379'535'048	151	764	372	C22H44O4	Octadecanoic acid, 2-(2-hydroxyethoxy)ethyl ester Octadecanoic acid	
5952	35.03	124'519'815	50	719		Inconnu	Isoamylaurate or homologue, F/RF 825/892	
7338	42.48	70'013'603	28	556		Inconnu	Squalene plus interference, biogenic	

La ou les méthodes marquées * n'entrent pas actuellement dans le champ de l'accréditation
 La ou les méthodes marquées ** ont été effectuées en sous-traitance
 Les informations relatives à l'analyse peuvent être obtenues sur demande
 Toute reproduction partielle ou modification du document doit être approuvée par le laboratoire
 Les résultats ne concernent que le ou les échantillons analysés



Date: 22.01.2011 Visa laboratoire: √ VS Visa chimiste: √ JJR

1188-1197 DIB, Bonfol, screening-Komm-MOe.xls

Résultats d'analyses: DIB, Bonfol, piézomètre SG 19b							Date d'analyse: 15.09.2010	Méthode: MON ME CHRO 004*
1190 / 10	Area	ng/l	% ID	MW	Formula	Name	Commentaire:	
Scan #	RT	(Area)	Fit					
325	4.75	170'134'381	108	890	132	C2H3Cl3	Ethane, 1,1,2-trichloro-	Ok, anthropogenic
361	4.94	126'457'010	80	907	112	C3H6Cl2	Propane, 1,3-dichloro-	Ok, anthropogenic
430	5.32	5'354'963'853	3'384	950	164	C2Cl4	Tetrachlorethylene	Ok, anthropogenic
611	6.29	10'002'640	6	814	112	C6H5Cl	Benzene, chloro-	Ok, anthropogenic
967	8.2	11'197'103'766	7'076	898	166	C2H2Cl4	Ethane, 1,1,2,2-tetrachloro-	Ok, anthropogenic
1309	10.04	45'796'778	29	878	116	C5H12N2O	Urea, tetramethyl-	Ok, both biogenic and anthropogenic origin
1385	10.45	24'015'954	15	782	146	C6H4Cl2	Benzene, 1,3-dichloro-	Ok, or isomer
1717	12.24	90'060'023	57	830	144	C7H12O3	1-Hydroxycyclohexanecarboxylic acid	Ok, or isomer, biogenic
1726	12.29	150'745'627	95	900	234	C2Cl6	Ethane, hexachloro-	Ok
1751	12.42	263'908'183	167	898	162	C8H18O3	Ethane, 1,1'-oxybis[2-ethoxy-]	Ok, or homologue, used as solvent, diff. Sources
1945	13.47	19'544'293	12	614			Inconnu	Hexanoic acid, 2-butyl-, methyl ester or isomer/homologue, biogenic
2128	14.45	75'851'737	48	877	137	C7H7NO2	Benzene, 1-methyl-2-nitro-	Ok
2210	14.89	138'182'039	87	873	180	C6H3Cl3	Benzene, 1,3,5-trichloro-	Ok, or isomer
2356	15.68	232'104'412	147	879	180	C6H3Cl3	Benzene, 1,2,3-trichloro-	Ok, or isomer
2619								Additionally found: Phenol, 2-(1,1-dimethylethyl)- or isomer, F/RF 861/871
2854	18.36	96'268'775	61	873	214	C6H2Cl4	Benzene, 1,2,4,5-tetrachloro-	Ok, or isomer
2866	18.42	45'038'171	28	860	214	C6H2Cl4	Benzene, 1,2,3,4-tetrachloro-	Ok, or isomer
2887	18.53	109'449'525	69	891	161	C6H5Cl2N	Benzenamine, 2,4-dichloro-	Ok, or isomer
2953	18.89	22'787'635	14	757	161	C6H5Cl2N	Aniline, 2,6-dichloro-	Ok, or isomer
2989	19.08	17'465'337	11	430			Inconnu	2-Iodo-4-trifluoromethylaniline or isomer (detailed structure analysis), anthropogenic
3379	21.18	75'095'013	47	768	232	C10H11F3N2O	Fluometuron	Ok
3720	23.02	27'515'509	17	713			Inconnu	Benzene, 1-chloro-4-(methylsulfonyl)-, F/RF 809/848, anthropogenic
3865	23.8	9'003'046	6	470			Inconnu	A substituted benzonitrile, MW 171, anthropogenic
4060	24.85	43'459'750	27	762	176	C13H20	Benzene, (1,1-diethylpropyl)-	Ok, or isomer/homologue
4243	25.83	37'708'914	24	825	224	C11H6N2O3	Butalbital	Ok
4750	28.56	11'008'295	7	752	194	C8H10N4O2	Caffeine	Ok
4844	29.06	13'914'654	9	724			Inconnu	2,6-Piperidinedione, 3-ethyl-3-phenyl-, F/RF 800/879, Glutethimid, Doriden, anthropogenic
5281	31.42	23'303'538	15	604			Inconnu	Not identifiable
5337	31.72	289'624'888	183	660			Inconnu	alpha...alpha.-Bis(2-cyanoethyl)benzyl cyanide (Wiley9), F/RF 730/984, anthropogenic
5528	32.75	56'326'724	36	690			Inconnu	Heptabarbital, F/RF 826/895, anthropogenic
5547	32.85	104'375'836	66	658			Inconnu	Not identifiable
7336	42.47	282'643'122	179	815	342	C25H42	2,6,10,14,18-Pentamethyl-2,6,10,14,18-eicosapentaene	Ok, Squalene, biogenic
7972	45.89	35'625'047	23	745			Inconnu	Cholest-5-en-3-ol (3.beta.)-, F/RF 796/814, biogenic

La ou les méthodes marquées * n'entrent pas actuellement dans le champ de l'accréditation

La ou les méthodes marquées ** ont été effectuées en sous-traitance

Les informations relatives à l'analyse peuvent être obtenues sur demande

Toute reproduction partielle ou modification du document doit être approuvée par le laboratoire

Les résultats ne concernent que le ou les échantillons analysés


 STS 485
 ISO/CEI 17025

Date: 22.01.2011

Visa laboratoire: √ VS

Visa chimiste: √ JJR

1188-1197 DIB, Bonfol, screening-Komm-MOe.xls

Résultats d'analyses: DIB, Bonfol, piézomètre SG 36							Date d'analyse: 15.09.2010	Méthode: MON ME CHRO 004*
1191 / 10	Area	ng/l	% ID	MW	Formula	Name	Commentaire Prof. M. Oehme	
Scan #	RT	(Area)	Fit					
405	5.18	24'731'101	19	744		Inconnu	Not identifiable, an alcohol? Prob. Biogenic	
533	5.87	13'068'339	10	683		Inconnu	An aliphatic alcohol, prob. Biogenic.	
2118	14.4	58'906'138	44	750	122	C7H6O2	Benzoic acid Ok, biogenic	
4490	27.16	88'327'765	66	829	228	C14H28O2	Tetradecanoic acid Ok, biogenic	
5131	30.61	297'219'107	223	870	256	C16H32O2	n-Hexadecanoic acid Ok, biogenic	
6802	39.6	35'878'241	27	598		Inconnu	Not identifiable, coelution of two compounds	
7335	42.47	34'992'445	26	559		Inconnu	Squalene plus undefined background, biogenic	

La ou les méthodes marquées * n'entrent pas actuellement dans le champ de l'accréditation
La ou les méthodes marquées ** ont été effectuées en sous-traitance
Les informations relatives à l'analyse peuvent être obtenues sur demande
Toute reproduction partielle ou modification du document doit être approuvée par le laboratoire
Les résultats ne concernent que le ou les échantillons analysés



STS 485
ISO/CEI 17025

Date: 22.01.2011 Visa laboratoire: √ VS Visa chimiste: √ JJR

1188-1197 DIB, Bonfol, screening-Komm-MOe.xls

Résultats d'analyses: DIB, Bonfol, piézomètre SG 46							Date d'analyse: 15.09.2010	Méthode: MON ME CHRO 004*
1192 / 10	RT	Area	ng/l	% ID	MW	Formula	Name	Commentaire Prof. M. Oehme
Scan #	RT		(Area)	Fit				
341	4.84	32'177'855	16	653			Inconnu	An aliphatic acid, biogenic
405	5.18	100'308'561	51	718			Inconnu	A mercapto or aliphatic alcohol, biogenic
432	5.33	85'156'682	43	914	164	C2Cl4	Tetrachlorethylene	Ok
531	5.86	71'803'722	37	763	102	C6H14O	1-Butanol, 2,3-dimethyl-	An aliphatic alcohol, biogenic
966	8.2	42'262'316	21	812	166	C2H2Cl4	Ethane, 1,1,2,2-tetrachloro-	Ok
1266	9.81	184'620'226	94	834	116	C6H12O2	Hexanoic acid	Ok, or homologue
1432	10.71	30'869'798	16	606			Inconnu	Not identifiable
2111	14.36	26'996'226	14	644			Inconnu	Benzoic acid plus interference, biogenic
4490	27.16	111'586'250	57	842	228	C14H28O2	Tetradecanoic acid	Ok, biogenic
5135	30.63	991'626'721	504	864	256	C16H32O2	n-Hexadecanoic acid	Ok, biogenic
5717	33.76	375'913'950	191	750	372	C22H44O4	Octadecanoic acid, 2-(2-hydroxyethoxy)ethyl ester	Octadecanoic acid
6140	36.04	52'515'585	27	710			Inconnu	2-Ethylhexyl trans-4-methoxycinnamate, F/RF 756/841, CAS 83834-59-7, sun screen protective
7070	41.04	48'513'995	25	555			Inconnu	3,3',5,5'-Tetra-tert-butyl-4,4'-dihydroxybiphenyl (Wiley9 and own library), a polymer additive
7337	42.48	292'963'295	149	800	384	C27H44O	Docosa-2,6,10,14,18-pentaen-22-al, 2,6,10,15,18-pentamethyl, alltrans	No, Squalene, biogenic
7972	45.89	39'481'973	20	701			Inconnu	Cholest-5-en-3-ol plus background, biogenic

La ou les méthodes marquées * n'entrent pas actuellement dans le champ de l'accréditation
 La ou les méthodes marquées ** ont été effectuées en sous-traitance
 Les informations relatives à l'analyse peuvent être obtenues sur demande
 Toute reproduction partielle ou modification du document doit être approuvée par le laboratoire
 Les résultats ne concernent que le ou les échantillons analysés



Date: 22.01.2011 Visa laboratoire: √ VS Visa chimiste: √ JJR

1188-1197 DIB, Bonfol, screening-Komm-MOe.xls

Résultats d'analyses: DIB, Bonfol, piézomètre VG 64							Date d'analyse: 15.09.2010	Méthode: MON ME CHRO 004*
1193 / 10	Area	ng/l	% ID	MW	Formula	Name	Commentaire Prof. M. Oehme	
Scan #	RT	(Area)	Fit					
400	5.15	321'253'084	353	737		Inconnu	An aliphatic alcohol, biogenic	
528	5.84	296'079'718	325	757	102	C6H14O	1-Butanol, 2,3-diméthyl-	
1074	8.78	36'335'238	40	814	132	C7H16O2	2-Propanol, 1-butoxy-	
3570	22.21	27'604'558	30	852	226	C16H34	Hexadecane	
4132	25.23	32'032'660	35	665		Inconnu	Benzene, 1,1'-(1,3-propanediyl)bis-, F/RF 710/941, plus interference by scan 4130 m/z 172 etc., origin?	
4296	26.12	34'412'949	38	833	240	C17H36	Heptadecane	
5127	30.59	86'850'772	95	783	256	C16H32O2	n-Hexadecanoic acid	
5259	31.3	44'329'917	49	775	268	C19H40	Nonadecane	
5419	32.16	392'492'167	431	686		Inconnu	Elemental sulfur S8, biogenic	
5716	33.76	50'994'121	56	622		Inconnu	Octadecanoic acid, biogenic	
6452	37.72	36'689'324	40	552		Inconnu	2,4,6-Triphenyl-1-hexene (Wiley9) or similar, F/RF 707/936, oligomer from polystyrene etc.	
6707	39.09	34'352'941	38	683		Inconnu	Contains phenyls and unsaturated chain carbins plus O, origin?	
7069	41.04	69'879'078	77	603		Inconnu	3,3',5,5'-Tetra-tert-butyl-4,4'-dihydroxybiphenyl (Wiley9 and own library), a polymer additive	
7851	45.24	142'450'129	157	744		Inconnu	Realted to 4a,7,7,10a-Tetramethyldodecahydrobenzo[f]chromen-3-ol, a sterol, biogenic	
8033	46.22	89'676'525	99	641		Inconnu	A sterol, biogenic	
8278	47.54	58'527'478	64	624		Inconnu	A sterol, biogenic	
8310	47.71	46'865'244	52	622		Inconnu	A sterol, biogenic	
8508	48.78	36'886'304	41	635		Inconnu	A sterol, biogenic	
8559	49.05	22'235'420	24	535		Inconnu	A sterol, biogenic	

La ou les méthodes marquées * n'entrent pas actuellement dans le champ de l'accréditation
 La ou les méthodes marquées ** ont été effectuées en sous-traitance
 Les informations relatives à l'analyse peuvent être obtenues sur demande
 Toute reproduction partielle ou modification du document doit être approuvée par le laboratoire
 Les résultats ne concernent que le ou les échantillons analysés



STS 485
 ISO/CEI 17025

Date: 22.01.2011 Visa laboratoire: √ VS Visa chimiste: √ JJR

1188-1197 DIB, Bonfol, screening-Komm-MOe.xls

Résultats d'analyses: DIB, Bonfol, piézomètre SG 66							Date d'analyse: 15.09.2010	Méthode: MON ME CHRO 004*
1194 / 10	Area		ng/l	% ID	MW	Formula	Name	Commentaire Prof. M. Oehme
Scan #	RT	(Area)	Fit					
775	7.17	36'162'958	36	784	102	C5H10O2	Pentanoic acid ou hexanoic acid	An alkanoic acid
3661	22.7	23'869'460	24	650			Inconnu	Not identifiable

La ou les méthodes marquées * n'entrent pas actuellement dans le champ de l'accréditation
 La ou les méthodes marquées ** ont été effectuées en sous-traitance
 Les informations relatives à l'analyse peuvent être obtenues sur demande
 Toute reproduction partielle ou modification du document doit être approuvée par le laboratoire
 Les résultats ne concernent que le ou les échantillons analysés



STS 485
ISO/CEI 17025

Date: 22.01.2011 Visa laboratoire: √ VS Visa chimiste: √ JJR

1188-1197 DIB, Bonfol, screening-Komm-MOe.xls

Résultats d'analyses: DIB, Bonfol, piézomètre SVG 31							Date d'analyse: 15.09.2010	Méthode: MON ME CHRO 004*
1195 / 10	Area	ng/l	% ID	MW	Formula	Name	Commentaire Prof. M. Oehme	
Scan #	RT	(Area)	Fit					
400	5.15	1'066'823'384	1'620	724		Inconnu	An aliphatic alcohol, biogenic	
528	5.84	1'029'676'595	1'563	759		Inconnu	An aliphatic ketone, biogenic	
570	6.07	25'327'783	38	800	102	C6H14O	1-Butanol, 2-ethyl- Ok, or other isomer/homologue	
2450	16.18	19'510'794	30	701		Inconnu	1H-Pyrrole-2,5-dione, 3-ethyl-4-methyl-, F/RF 813/891, biogenic, part of Rooibos tea and acts as pheromone	
2827	18.21	29'811'418	45	515		Inconnu	Not identifiable, chain-line, ether function, prob. biogenic	
3570	22.21	29'220'254	44	838	226	C16H34	Hexadecane Ok, or other homologue	
3628	22.52	38'771'799	59	620		Inconnu	Not identifiable, N-containing, chain-like, hardly anthropogenic	
3679	22.8	40'474'050	61	766	180	C11H16O2	2(4H)-Benzofuranone, 5,6,7,7a-tetrahydro-4,4,7a-trimethyl- Ok, a plant constituent, biogenic	
3780	23.34	82'575'915	125	746	168	C8H8O4	2,6-Dimethoxybenzoquinone Ok, a plant constituents, biogenic	
3875	23.85	21'892'466	33	528		Inconnu	Co-elution of two compounds (m/z 76 and 90), not resolvable	
4243	25.83	43'711'017	66	842	212	C14H28O	Tetradecanal Ok, or homologue	
4296	26.12	48'269'368	73	872	240	C17H36	Heptadecane Ok, or homologue	
4492	27.17	41'149'219	62	527		Inconnu	Prob. 9-octadeceneamide or homologue, F/RF 730/810, biogenic	
4514	27.29	38'119'909	58	639		Inconnu	(-)-Loliolide (Wiley9), F/RF 820/913, a terpenoid, biogenic	
4748	28.55	35'089'070	53	832	296	C20H40O	3,7,11,15-Tetramethyl-2-hexadecen-1-ol No, rather neophytadiene (Wiley9), MW278, F/RF 868/945, biogenic	
4917	29.46	102'233'988	155	778	254	C17H34O	(R)-(-)-(Z)-14-Methyl-8-hexadecen-1-ol No, many possibilities, a chained unsaturated O-containing molecule of biogenic origin.	
4990	29.85	51'957'172	79	674		Inconnu	Similar to 1,3,5-Cycloheptatriene, 2,4-di-t-butyl-7,7-dimethyl- or homologue, prob. biogenic	
5128	30.59	266'064'672	404	843	256	C16H32O2	n-Hexadecanoic acid Ok	
5258	31.29	82'402'309	125	722		Inconnu	An alkane	
5320	31.63	108'171'583	164	786	212	C14H28O	Tetradecanal Or homologue or even an unsaturated alcohol, biogenic	
5422	32.17	144'687'329	220	599		Inconnu	Not identifiable	
5572	32.98	44'857'869	68	704		Inconnu	Prob. Phytol or isomer, F/RF 870/920, biogenic	
5644	33.37	51'580'860	78	525		Inconnu	Could be 2-Chloro-N-(4-phenyl-thiazol-2-yl)-acetamide plus interference m/z 158 etc., antibacterial compound more modern than Bonfol	
5657	33.44	78'548'000	119	710		Inconnu	Palmitaldehyde (Wiley9) or similar, biogenic	
5682	33.56	55'474'039	84	642		Inconnu	Not found, co-elution with compound present in blank??	
5715	33.75	100'907'537	153	651		Inconnu	Octadecanoic acid (F/RF 825/885) plus interference m/z 178	
6100	35.82	87'080'214	132	605		Inconnu	An alkane plus interferences from scan 6096	
6382	37.34	27'072'002	41	468		Inconnu	Not identifiable	
6654	38.8	32'253'126	49	490		Inconnu	DODECYLTETRAGLYCOL or homologue, group of solvent, different origin	

La ou les méthodes marquées * n'entrent pas actuellement dans le champ de l'accréditation
 La ou les méthodes marquées ** ont été effectuées en sous-traitance
 Les informations relatives à l'analyse peuvent être obtenues sur demande
 Toute reproduction partielle ou modification du document doit être approuvée par le laboratoire
 Les résultats ne concernent que le ou les échantillons analysés



Date: 22.01.2011 Visa laboratoire: √ VS Visa chimiste: √ JJR

1188-1197 DIB, Bonfol, screening-Komm-MOe.xls

Résultats d'analyses: DIB, Bonfol, piézomètre SVG 31							Date d'analyse: 15.09.2010	Méthode: MON ME CHRO 004*
1195 / 10	Area	ng/l	% ID	MW	Formula	Name	Commentaire Prof. M. Oehme	
Scan #	RT	(Area)	Fit					
6928	40.28	53'441'808	81	677		Inconnu	An alkyl aldehyde, biogenic	
7075	41.07	41'538'656	63	604		Inconnu	An alkane plus interferences	
7333	42.46	230'547'016	350	758	410	C30H50	2,6,10,14,18,22-Tetracosahexaene, 2,6,10,15,19,23-hexamethyl-, (all-E)-	
7391	42.77	637'005'276	967	813	268	C18H36O	Octadecanal	
7527	43.5	873'460'513	1'326	836	254	C16H30O2	13-Tertadecen-1-ol acetate	
7565	43.7	82'042'087	125	685	490	C35H70	Inconnu	
7629	44.05	65'206'677	99	593			Inconnu	
7828	45.12	281'482'408	427	797	212	C14H28O	Tetradecanal	
7881	45.4	49'371'844	75	519			Inconnu	
7889	45.44	47'714'173	72	611			Inconnu	
7914	45.58	42'172'295	64	470			Inconnu	
7964	45.85	685'202'000	1'040	804	386	C27H46O	Cholesterol	
8063	46.38	110'034'334	167	711			Inconnu	
8221	47.23	150'105'085	228	680			Inconnu	
8293	47.62	126'962'023	193	790	412	C29H48O	Stigmasta-5,22-dien-3-ol	
8307	47.69	87'548'671	133	487			Inconnu	
8366	48.01	118'785'312	180	663			Inconnu	
8461	48.52	378'350'969	574	803	414	C29H50O	Stigmasterol, 22,23-hydro-	

La ou les méthodes marquées * n'entrent pas actuellement dans le champ de l'accréditation
 La ou les méthodes marquées ** ont été effectuées en sous-traitance
 Les informations relatives à l'analyse peuvent être obtenues sur demande
 Toute reproduction partielle ou modification du document doit être approuvée par le laboratoire
 Les résultats ne concernent que le ou les échantillons analysés



STS 485
 ISO/CEI 17025

Date: 22.01.2011 Visa laboratoire: √ VS Visa chimiste: √ JJR

1188-1197 DIB, Bonfol, screening-Komm-MOe.xls

Résultats d'analyses: DIB, Bonfol, source Q 23							Date d'analyse: 15.09.2010	Méthode: MON ME CHRO 004*
1196 / 10	Area	ng/l	% ID	MW	Formula	Name	Commentaire Prof. M. Oehme	
Scan #	RT	(Area)	Fit					
407	5.2	6'055'751'843	6'434	715		Inconnu	An aliphatic alkohol, biogenic	
535	5.88	5'327'450'964	5'660	744		Inconnu	An aliphatic alkohol, biogenic	
651	6.5	84'791'552	90	756	104	C4H8O3	No, a brachned unsaturated alkohol, prob. biogenic	
685	6.69	89'916'681	96	773	126	C8H14O	1-Hexyn-3-ol, 3,5-dimethyl	
780	7.2	45'713'645	49	757	102	C5H10O2	Pentanoic acid	
971	8.23	193'155'943	205	905	166	C2H2Cl4	Ethane, 1,1,2,2-tetrachloro-	
1011	8.44	50'487'823	54	805	114	C6H10O2	2,5-Hexanedione	
1113	8.99	67'213'040	71	793	112	C6H8O2	2(5H)-Furanone, 5,5-dimethyl-	
1304	10.02	207'552'183	221	803	116	C5H12N2O	Urea, tetramethyl-	
1485	10.99	35'634'749	38	661		Inconnu	Possibly (3E,7S)-7-Hydroxynon-3-en-5-one (Wiley9), terpenoid, biogenic	
1576	11.48	109'446'396	116	612		Inconnu	Not identifiable	
1646	11.85	55'785'437	59	732		Inconnu	Mixed spectrum, not identifiable	
1720	12.26	133'820'639	142	722		Inconnu	An unsaturated ,branched alkohol, biogenic	
1754	12.44	94'484'093	100	894	162	C8H18O3	Ethane, 1,1'-oxybis(2-ethoxy-)	
1784	12.59	166'469'906	177	771	150	C10H14O	a-Ethyl-à-methylbenzyl alcohol	
1804	12.71	13'582'328	14	653		Inconnu	Not identifiable	
1814	12.76	56'076'811	60	760	139	C9H17N	Nonanenitrile	
1901	13.23	28'341'998	30	704		Inconnu	Ok, pelargononitrile, plant constituent	
1954	13.51	54'391'138	58	703		Inconnu	A terpenoid, biogenic	
2041	13.98	52'825'382	56	847	138	C9H14O	Bicyclo(3,1,1)heptan-2-one, 6,6-dimethyl-(1 R)-	
2063	14.1	58'303'739	62	816	152	C9H12O2	2,6,6-Trimethyl-2-cyclohexene-1, 4-dione	
2081	14.2	31'211'026	33	601		Inconnu	Ketosisophorone, a fragrance agent, waste water influence?	
2101	14.31	17'635'002	19	629		Inconnu	Not found, diffuse and disturbed background spectrum	
2127	14.44	157'780'176	168	769	138	C10H18	2,6-Dimethylbicyclo(3,2,1)octane	
2148	14.56	53'412'802	57	577		Inconnu	Ok, or isomer, a terpenen, biogenic	
2317	15.47	32'475'972	35	569		Inconnu	Not identifiable	
2390	15.86	71'381'256	76	625		Inconnu	Not identifiable	
2409	15.96	23'285'682	25	620		Inconnu	Not identifiable	
2438	16.12	96'489'487	103	859	135	C7H5NS	1,2-Benzisothiazole	
2453	16.2	65'012'279	69	758	139	C7H9NO2	1H-Pyrrole-2,5-dione, 3-ethyl-4-methyl	
2522	16.57	39'200'592	42	610		Inconnu	Ok, tea constituent and pheromone, biogenic	
2530	16.61	34'814'532	37	605		Inconnu	Terpenoid, biogenic	
2540	16.67	22'205'249	24	609		Inconnu	MS too diffuse, real?	

La ou les méthodes marquées * n'entrent pas actuellement dans le champ de l'accréditation
 La ou les méthodes marquées ** ont été effectuées en sous-traitance
 Les informations relatives à l'analyse peuvent être obtenues sur demande
 Toute reproduction partielle ou modification du document doit être approuvée par le laboratoire
 Les résultats ne concernent que le ou les échantillons analysés



STS 485
 ISO/IEC 17025

Date: 22.01.2011 Visa laboratoire: √ VS Visa chimiste: √ JJR

1188-1197 DIB, Bonfol, screening-Komm-MOe.xls

Résultats d'analyses: DIB, Bonfol, source Q 23							Date d'analyse: 15.09.2010	Méthode: MON ME CHRO 004*
1196 / 10	RT	Area	ng/l	% ID	MW	Formula	Name	Commentaire Prof. M. Oehme
Scan #		(Area)	(Area)	Fit				
2559	16.77	69'722'822	74	671			Inconnu	A terpenoid, biogenic
2574	16.85	33'934'649	36	554			Inconnu	1H-Pyrrole-2,5-dione, 3-ethenyl-4-methyl- plus interference, F/Rf 670/870, natural compound
2641	17.21	77'767'747	83	708			Inconnu	Isotridecanol or isomer/homologue, biogenic
2657	17.3	183'523'619	195	627			Inconnu	Not identifiable
2829	18.22	85'144'395	90	600			Inconnu	Not identifiable, chain-line, ether function, prob. biogenic
2861	18.39	30'061'497	32	683			Inconnu	Prob. a chained alcohol, biogenic
2891	18.56	36'712'787	39	647			Inconnu	Not identifiable
2946	18.85	44'095'089	47	554			Inconnu	A benzoyl derivative
3105	19.71	18'637'965	20	771	156	C7H8O2S	Sulfone, methyl phenyl	Ok
3319	20.86	20'549'897	22	630			Inconnu	2H-1-BENZOPYRAN-2-ONE, F/Rf 673/984, coumarin, biogenic
3566	22.19	178'607'137	190	862	222	C10H22O5	2,5,8,11,14-Pentaoxapentadecane	Ok, a polyether, solvent, diff. sources
3680	22.8	87'850'771	93	792	180	C11H16O2	2(4H)-Benzofuranone, 5,6,7,7a-tetrahydro-4,4,7a-trimethyl	Ok, a plant constituent, biogenic
3783	23.36	66'568'301	71	694			Inconnu	2,6-Dimethoxybenzoquinone, a plant constituent, biogenic
4243	25.83	348'097'381	370	643			Inconnu	A chained aldehyde or unsaturated alcohol, biogenic
4280	26.03	137'854'559	146	612			Inconnu	A dichlorophenylmethylsulfone, own library
4297	26.12	160'729'440	171	811	240	C17H36	Heptadecane	Ok, or homologue
4409	26.72	99'784'440	106	831	240	C13H24N2O2	Cropropamide	Ok
4490	27.16	290'429'678	309	744			Inconnu	Tetradecanoic acid, F/Rf 883/931
4687	28.22	918'595'360	976	923	212	C14H28O	Tetradecanal	Ok, or homologue
4749	28.55	248'821'028	264	831	296	C20H40O	3,7,11,15-Tetramethyl-2-hexadecen-1-ol	No, rather neophytadiene (Wiley9), MW278, F/Rf 931/959, biogenic
4798	28.82	52'920'054	56	559			Inconnu	Not identifiable, mixed MS
4885	29.3	92'536'204	98	712			Inconnu	3,7,11,15-Tetramethyl-2-hexadecen-1-ol, F/Rf 871/951, biogenic
4982	29.81	35'038'578	37	553			Inconnu	Not identifiable, mixed MS
5009	29.96	82'261'281	87	638			Inconnu	Diffuse mass spectrum of a chained molecule
5067	30.26	173'948'985	185	614			Inconnu	Not identifiable
5140	30.66	3'771'081'629	4'007	842	256	C16H32O2	n-Hexadecanoic acid	Ok
5244	31.22	121'730'969	129	723			Inconnu	A chained, O-containing molecule
5259	31.3	122'768'471	130	685			Inconnu	An alkane
5429	32.21	241'053'066	256	693			Inconnu	An alkanic acid, biogenic
5480	32.49	340'400'263	362	735			Inconnu	An aliphatic branched alcohol or ester, biogenic
5575	33	322'007'603	342	803	296	C20H40O	Phytol	Ok, biogenic
5605	33.16	44'350'006	47	519			Inconnu	Diffuse mass spectrum, not identifiable
5629	33.29	104'097'977	111	680			Inconnu	An alkenic acid, biogenic
5648	33.39	231'369'464	246	744			Inconnu	An alkenic acid, biogenic
5659	33.45	252'410'803	268	640			Inconnu	Diffuse mass spectrum, not identifiable

La ou les méthodes marquées * n'entrent pas actuellement dans le champ de l'accréditation
 La ou les méthodes marquées ** ont été effectuées en sous-traitance
 Les informations relatives à l'analyse peuvent être obtenues sur demande
 Toute reproduction partielle ou modification du document doit être approuvée par le laboratoire
 Les résultats ne concernent que le ou les échantillons analysés



STS 485
 ISO/CEI 17025

Date: 22.01.2011 Visa laboratoire: √ VS Visa chimiste: √ JJR

1188-1197 DIB, Bonfol, screening-Komm-MOe.xls

Résultats d'analyses: DIB, Bonfol, source Q 23							Date d'analyse: 15.09.2010	Méthode: MON ME CHRO 004*
1196 / 10	RT	Area	ng/l	% ID	MW	Formula	Name	Commentaire Prof. M. Oehme
Scan #		(Area)	(Area)	Fit				
5733	33.85	10'285'335'229	10'928	851	284	C18H36O2	Octadecanoic acid	Ok
5790	34.15	50'545'452	54	663			Inconnu	Prob. hexadecanoic acid butylester, MW312, biogenic
5833	34.39	210'934'289	224	773	310	C22H46	Docosane	Or hologue
7077	41.09	125'266'025	133	718			Inconnu	A chained alkohol or alkene
7333	42.46	398'822'924	424	785	342	C25H42	2,6,10,14,18-Pentamethyl-2,6,10,14,18-eicosapentaene	Ok, squalene, biogenic
7391	42.77	2'314'145'733	2'459	829	226	C15H30O	Pentadecanal-	Many possibilities, chained, MW 362, not identifiable
7530	43.52	9'276'109'026	9'856	840	490	C35H70	1,7-Pentatriacontene	No, rather an alkene MW364, ev. an alkohol MW364+18
7829	45.12	725'914'948	771	792	226	C15H30O	Pentadecanal-	No, MW392 well visible, many possibilities, chained, unsaturated or O
7894	45.47	448'734'585	477	815	388	C27H48O	Cholestanol	Ok, biogenic
7957	45.83	270'269'958	287	796	618	C44H90	Tetratetracontane	Ok, or other homologue
7968	45.87	1'304'366'167	1'386	827	386	C27H46O	17-(1,5-Dimethylhexyl)-10,13-dimethyl-2,3,4,7,8,9,10,11,12,13,14,15,16,17-tetradecahydro-1H-cyclopenta(a)phenanthren-3-ol	Ok, Cholestanol, biogenic
7995	46.02	257'505'228	274	666			Inconnu	Sterol structure with MW 430, biogenic
8137	46.79	239'040'115	254	762	402	C28H50O	Ergostanol	Several possibilities, a sterol with MW 402, biogenic
8211	47.18	276'133'767	293	651			Inconnu	4-DESMETHYLDINOSTEROL or isomer, biogenic
8224	47.25	291'185'070	309	715			Inconnu	Sterol structure with MW 414, biogenic
8256	47.42	156'575'818	166	605			Inconnu	Sterol structure with MW 414, biogenic
8310	47.71	508'872'578	541	662			Inconnu	Coelution of sterol
8368	48.02	1'192'776'363	1'267	681			Inconnu	Stigmastanol or isomer, biogenic
8475	48.6	965'568'974	1'026	803	414	C29H50O	Stigmasterol, 22, 23-dihydro	Ok, or isomer
8504	48.75	647'179'624	688	654			Inconnu	Ethylcholestanol or isomer, biogenic
8587	49.2	105'684'892	112	749			Inconnu	beta-Amyrin or isomer, biogenic

La ou les méthodes marquées * n'entrent pas actuellement dans le champ de l'accréditation
 La ou les méthodes marquées ** ont été effectuées en sous-traitance
 Les informations relatives à l'analyse peuvent être obtenues sur demande
 Toute reproduction partielle ou modification du document doit être approuvée par le laboratoire
 Les résultats ne concernent que le ou les échantillons analysés



STS 485
 ISO/CEI 17025

Date: 22.01.2011 Visa laboratoire: √ VS Visa chimiste: √ JJR

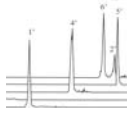
1188-1197 DIB, Bonfol, screening-Komm-MOe.xls

Résultats d'analyses: DIB, Bonfol, source Q 9							Date d'analyse: 15.09.2010	Méthode: MON ME CHRO 004*
1197 / 10		Area	ng/l	% ID	MW	Formula	Name	Commentaire Prof. M. Oehme
Scan #	RT	(Area)	Fit					
407	5.19	128'174'853	259	744			Inconnu	An aliphatic alcohol, biogenic
534	5.87	100'539'942	203	772	102	C6H14O	1-Butanol, 2,3-dimethyl-	An aliphatic alcohol, biogenic, different possibilites
3782	23.35	6'040'882	12	466			Inconnu	Distorted spectrum of 2,6-dimethoxybenzoquinone due to MS problem, biogenic plant constituent
4752	28.57	3'261'314	7	539			Inconnu	Not identifiable

La ou les méthodes marquées * n'entrent pas actuellement dans le champ de l'accréditation
 La ou les méthodes marquées ** ont été effectuées en sous-traitance
 Les informations relatives à l'analyse peuvent être obtenues sur demande
 Toute reproduction partielle ou modification du document doit être approuvée par le laboratoire
 Les résultats ne concernent que le ou les échantillons analysés



Date: 22.01.2011 Visa laboratoire: √ VS Visa chimiste: √ JJR



Herr Jean-Jacques Roth
République et canton du Jura
Laboratoire cantonal
fbg des Capucins 20
2800 Delémont

IHRE REF. :

UNSERE REF. :
2008-1043

NIEDERTEUFEN AR,
29. Dezember 2010

Kommentare Screenings Wasserproben Bonfol 2010

Sehr geehrter Herr Roth,

beiliegend sende ich Ihnen meine Kommentare zu den Screenings der Wasserproben. Ich habe die Identifikationen nachgeprüft und soweit möglich bei den Unbekannten weitere Abklärungen vorgenommen. Bitte beachten Sie, dass alle Identifikationen tentativ sind, solange diese nicht mit Referenzverbindungen bestätigt worden sind. Da die Qualität der Massenspektren wesentlich besser als 2009 war, konnte ich fast alle unbekannte Verbindungen identifizieren bzw. deren Stoffklasse feststellen. Ich habe meine Kommentare in generelle und probenspezifische Anmerkungen aufgeteilt.

Generelle Anmerkungen:

- Ich habe diesmal alle detektierbaren Verbindungen inklusive diejenigen <50 ng/l angesehen und sowohl deren Struktur als auch Herkunft (soweit bekannt) angemerkt, um diverse Einflüsse einer generellen Belastung durch Abwasser, Landwirtschaft etc. von einer Beeinflussung durch die Deponie Bonfol klar und eindeutig abgrenzen zu können. Ich nehme an, dass dies auch im Interesse der Umweltschutzbehörden des Kantons Jura ist.
- Bitte in Zukunft bei allen Massenspektren das Basision in einer separaten Spalte angeben wie schon in den Kommentaren für 2009 angemerkt. Speziell bei den Massenspektren von Unbekannten kann sonst nicht immer überprüft werden, ob man das gleiche Spektrum ansieht. Eine weitere Spalte mit den CAS-Nummer wäre zudem hilfreich (bereits 2009 angemerkt).

- Die Wiederfindungen des internen Standards Naphthalin-D8 sind generell zu niedrig und liegen meist unter 50%. Ausserdem zeigen die Proben 1193-1195 und 1197 zu grosse Verluste für praktisch alle internen Standards. Dies deutet möglicherweise auf Verluste beim Extrakteinengen hin. Diese Prozedur sollte daher zusammen mit anderen Möglichkeiten von Verlusten vor dem nächsten Screening diskutiert werden. Wiederfindungen von etwa 30% für Anilin-D5 und von 5-10% für Phenol-D5 sind normal und zeigen die Begrenzung der Extraktionsmethode. Eine Verbesserung der Wiederfindung bei der Extrakteinengung beeinflusst diese Verbindungen proportional.
- Das Gaschromatogramm der Probe 1196 war durch hohen Hintergrund teilweise überladen. Auch hier sollten andere Möglichkeiten der Injektion diskutiert werden
- Die Massenspektren sind von wesentlich besserer Qualität als 2009. Allerdings traten bei niedrigeren Konzentrationen immer noch Signalaufspaltungen auf, welche zu falschen oder doppelten Massensignalen führen und nur durch einen Zusatzaufwand meinerseits korrigiert werden konnten. Es sollten daher vor den Screenings 2011 entsprechende Gerätekontrollen durchgeführt werden. Details sowie Ratschläge zur Reinigung Ionenquelle/Vorfilter sollten vor Ort besprochen werden.
- Die von mir gefundenen Übereinstimmungen zwischen Proben- und Bibliotheksspektrum sind wiederum in der Regel besser. Dies deutet auf eine nicht optimale Selektion der Probenspektren und der Hintergrundsubtraktion hin. Entsprechende Verbesserungen sollten vor Ort besprochen werden.

Spezifische Anmerkungen zu den Proben:

Verwendete Abkürzungen:

MW: Molekülmasse

MS: Massenspektrum

Substanzspezifische Anmerkungen sind diesmal in die Rubrik „Commentaire Prof. M. Oehme“ angegeben. Die Proben können wie folgt charakterisiert werden:

Probe 1188:

Neben Substanzen typisch für die Deponie Bonfol treten auch solche auf, die für Landwirtschaft (Mist/Gülle) sowie Kläranlagen typisch sind. Zudem wurden auch Verbindungen biogenen Ursprungs und aus einer allgemeinen Umweltbelastung (Polymeradditive) identifiziert.

Probe 1189:

Nur Verbindungen biogenen Ursprungs feststellbar.

Probe 1190:

Neben typischen Verbindungen der Deponie Bonfol treten auch Verbindungen auf, die typisch für Kläranlagen sind wie Koffein oder Cholestenol.

Probe 1191:

Nur Verbindungen biogenen Ursprungs feststellbar.

Probe 1192

Bis auf Tetrachlorethylen nur Verbindungen biogenen Ursprungs sowie aus Kläranlagen (z:B. Scan 6140) feststellbar. Tetrachlorethylen in so geringen Konzentrationen kann verschiedene (alte) Quellen haben.

Probe 1193:

Nur Verbindungen biogenen oder landwirtschaftlichen Ursprungs feststellbar. Das Polymeradditive Scan 7069 kann auch aus Schläuchen und Pumpen stammen.

Probe 1194:

Nur Verbindungen biogenen Ursprungs feststellbar.

Probe 1195:

Nur Verbindungen biogenen oder landwirtschaftlichen Ursprungs feststellbar.

Probe 1196:

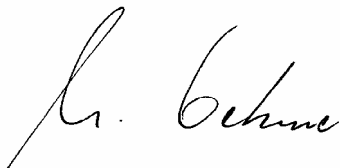
Stark belastet durch Landwirtschaft und/oder Verbindungen, die im ZuLauf/Ablauf von Kläranlagen vorkommen. Ausserdem Substanzen biogenen Ursprungs feststellbar. Methylphenylsulfon kommt auch im Auslauf von Kläranlagen vor (diverse Quellen). Kein Einfluss der Deponie Bonfol feststellbar.

Probe 1197:

Nur Verbindungen biogenen oder landwirtschaftlichen Ursprungs feststellbar.

Für Fragen und Präzisierungen stehe ich jederzeit zur Verfügung.

Mit freundlichen Grüßen:



Prof. Dr. Michael Oehme