

ASSAINISSEMENT DÉFINITIF DE LA DÉCHARGE INDUSTRIELLE DE BONFOL

SUIVI ENVIRONNEMENTAL DE RÉALISATION

RAPPORT INTERMÉDIAIRE 37 - 2013

Domaine : Eaux

Sujet : Analyses par screening des eaux de 10 piézomètres de la nappe phréatique ainsi que du lixiviat de la DIB (prélèvements du 10 septembre 2013)

Date : 24 février 2017

TABLE DES MATIÈRES

1. ANALYSES EFFECTUÉES	3
1.1 Contexte	3
1.2 Points échantillonnés	4
1.3 Déroulement de la campagne de prélèvement	5
1.4 Réalisation des analyses	5
2. RÉSULTATS DES SCREENINGS	5
2.1 Piézomètres dans la nappe phréatique	5
2.2 Lixiviats	5
3. DOCUMENTS ANNEXÉS	6
4. PROCHAINES CAMPAGNES	6

LISTE DES TABLEAUX

Tableau 3.1 Documents annexés	6
-------------------------------	---

LISTE DES FIGURES

Figure 1 : Situation des points de surveillance de l'environnement ayant fait l'objet de screenings	4
---	---

ANNEXES

ANNEXE A Résultats des analyses	8
---------------------------------	---

PRÉAMBULE

CSD confirme par la présente avoir exécuté son mandat avec la diligence requise. Les résultats et conclusions sont basés sur l'état actuel des connaissances tel qu'exposé dans le rapport et ont été obtenus conformément aux règles reconnues de la branche.

CSD se fonde sur les prémisses que :

- le mandant ou les tiers désignés par lui ont fourni des informations et des documents exacts et complets en vue de l'exécution du mandat,
- les résultats de son travail ne seront pas utilisés de manière partielle,
- sans avoir été réexaminés, les résultats de son travail ne seront pas utilisés pour un but autre que celui convenu ou pour un autre objet ni transposés à des circonstances modifiées.

Dans la mesure où ces conditions ne sont pas remplies, CSD décline toute responsabilité envers le mandant pour les dommages qui pourraient en résulter.

Si un tiers utilise les résultats du travail ou s'il fonde des décisions sur ceux-ci, CSD décline toute responsabilité pour les dommages directs et indirects qui pourraient en résulter.

1. Analyses effectuées

1.1 Contexte

La campagne d'analyses par screening faisant l'objet du présent RISER répond aux exigences de la convention conclue entre Greenpeace Suisse et la Fondation Edith Maryon d'une part et le Gouvernement de la République et Canton du Jura et bci Betriebs-AG d'autre part, en date du 11 janvier 2008 par devant le Président de la Chambre administrative du Tribunal cantonal. Dans son point I, cette convention stipule que les prescriptions du plan spécial cantonal « Assainissement de la décharge industrielle de Bonfol) seront modifiées, entre autre, par l'ajout d'un nouvel article 22^{bis} :

Prescriptions relatives aux contrôles avant et pendant l'assainissement (nouveau)

Article 22^{bis} : analyses (nouveau)

Al. 1 Avant de procéder aux travaux d'assainissement, des analyses par screening seront effectuées dans 10 piézomètres existants déterminés par l'autorité cantonale situés en aval de la DIB (dans la nappe phréatique), ainsi que dans les lixiviats de celle-ci.

Al. 2 Ces mêmes analyses seront effectuées une fois par an pendant toute la durée de l'assainissement.

Par ailleurs, cette même **convention** prévoit à son article IV que les analyses par screening se feront sous la conduite du Professeur Oehme et selon la méthode qu'il préconisera au cas particulier.

Ces exigences sont reprises dans les points 10.2 et 25.1 de l'autorisation en matière de protection de l'environnement pour les entreprises industrielles et artisanales de l'Office de l'environnement (ENV) du 30.04.08 octroyée dans le cadre du **permis de construire de la halle d'excavation, de la halle de préparation et du pavillon** :

10 Protection des eaux souterraines

10.2 Contrôle et surveillance

Avant d'entreprendre tous travaux d'assainissement, le requérant devra procéder à des analyses par screening des eaux du lixiviat ainsi que d'au moins 10 piézomètres situés dans la nappe phréatique, à l'aval de la décharge, dont l'emplacement sera déterminé par ENV. Ces analyses seront suivies par le RSE et réalisées en coordination avec M. le Prof. Oehme selon la méthode que ce dernier préconisera. Ces mêmes analyses seront répétées à raison d'une fois par année durant toute la phase d'assainissement.

25 Eaux souterraines

Les analyses par screening des eaux du lixiviat ainsi que d'au moins 10 piézomètres situés dans la nappe phréatique, prévues selon l'art. 10.2 de la présente, seront répétées à raison d'une fois par année durant toute la phase d'assainissement.

Les analyses par screening dont les résultats sont présentés en annexes et discutés ci-dessous, correspondent à la cinquième campagne annuelle. Les campagnes précédentes ont fait l'objet des RISER 51-09, 41-10, 37-11 et 37-12.

1.2 Points échantillonnés

Conformément à la convention et à l'autorisation précitées, la liste des piézomètres à intégrer dans la campagne a été établie par l'autorité cantonale (ENV). Il s'agit des points suivants (cf. situation sur la Figure 1).

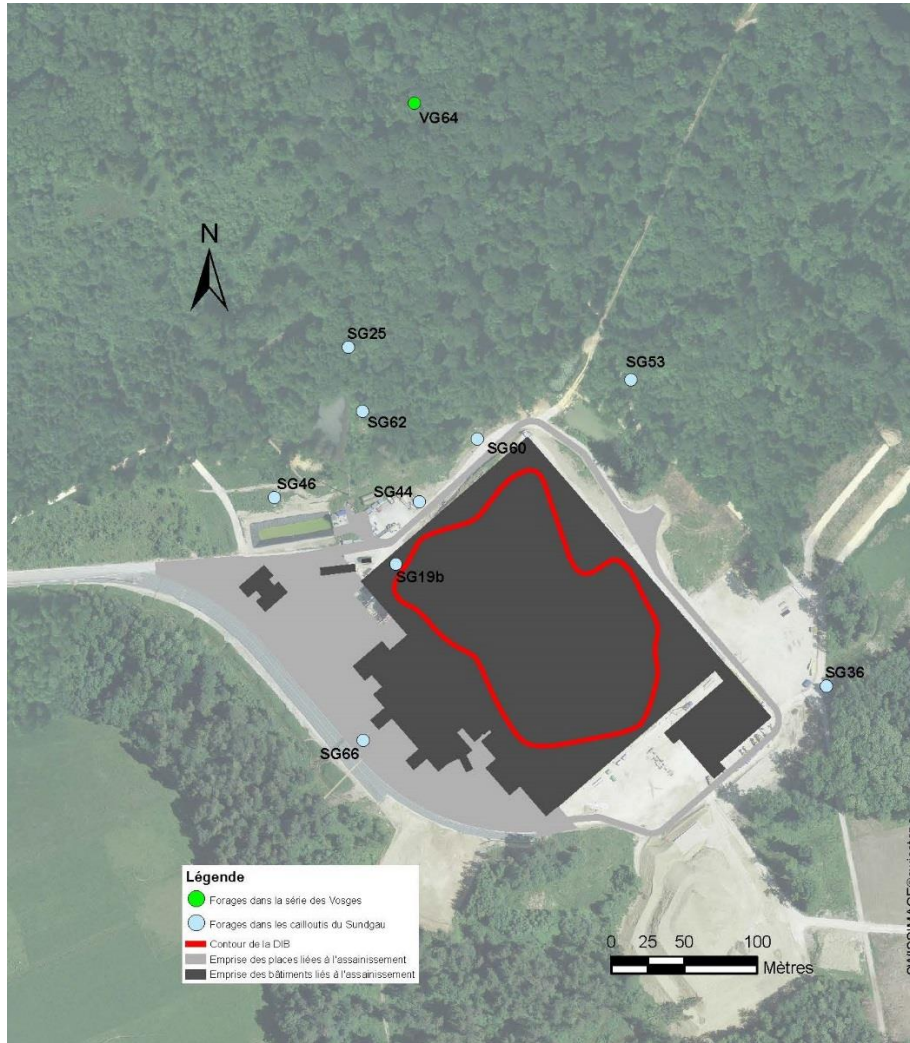


Figure 1 : Situation des points de surveillance de l'environnement ayant fait l'objet d'analyse par screening

- SG36 en tant que point de référence en amont hydraulique de la décharge.
- SG66, SG19b, SG44, SG60 et SG62 en tant que points situés dans les cailloutis du Sundgau, à proximité de la DIB et en aval. Le forage SG15 (piézomètre battu dans les Cailloutis du Sundgau) qui était échantillonné dans le cadre des campagnes screening jusqu'à présent, a été supprimé le 20 février 2013, dans le cadre des travaux préparatoires pour le déplacement de la halle d'excavation. Il a été remplacé, en accord avec l'ENV, par le piézomètre SG62.
- SG46, SG25 et SG53 en tant que points situés dans les cailloutis du Sundgau, à distance modérée de la DIB.
- VG64 en tant que point situé à plus grande distance de la DIB.

L'échantillon de lixiviats de la DIB a été prélevé dans la chambre RC7, juste en amont de la station d'épuration (STEP) de la DIB.

1.3 Déroulement de la campagne de prélèvement

Les prélèvements dans les piézomètres désignés par l'ENV ont été effectués le 10 septembre 2013, dans le cadre du suivi environnemental de la réalisation (SER) mis sur pied pour le chantier d'assainissement de la DIB. Les échantillons ont été prélevés par le bureau CSD, conformément à la méthode définie en collaboration avec le Prof. Oehme lors d'une séance tenue le 25 mars 2009, en présence de ce dernier ainsi que de représentants de bci Betriebs-AG et de CSD.

1.4 Réalisation des analyses

Les analyses par screening ont été effectuées par le laboratoire Arcadis (BMG) et supervisées par le Prof. Oehme. L'ensemble des procédés utilisés a été validé par le Prof. Oehme et est décrit dans le document « Screeningverfahren auf unbekannte Verbindungen in Wasserproben mittels GC-MS, version du 16 décembre 2009 », élaboré spécifiquement par le Prof. Oehme.

2. Résultats des analyses par screening

Les résultats des analyses par screening des eaux prélevées dans les piézomètres ainsi que du lixiviât et leur interprétation font l'objet du rapport Arcadis (BMG) «GC-MS Screenings: Interpretation der Ergebnisse der Beprobung vom September 2013 » du 14 décembre 2016. Ce document est présenté en annexe. L'interprétation des résultats bruts a été soumise au Professeur Oehme pour validation (voir son rapport de commentaires du 25 mars 2014 annexé au document Arcadis). Les commentaires du Professeur Oehme ont été pris en compte dans la version finale du rapport Arcadis (en rouge sur les tableaux des résultats).

2.1 Piézomètres dans la nappe phréatique

Les résultats indiquent que seules les eaux prélevées dans le piézomètre SG19b montrent la présence de substances clairement issues de la DIB. Les substances détectées dans les autres piézomètres ont un caractère géogène, anthropogène ou ubiquiste et, dans ce dernier cas, leur origine ne peut pas être déterminée.

2.2 Lixiviats

L'analyse par screening permet de vérifier que l'ensemble des composés pertinents, de par leur concentration et leur toxicité, est bien pris en compte dans la surveillance de la DIB et de son environnement. Les principales familles de substances trouvées lors du screening sont analysées dans le cadre du CSS. Au total, 95% des signaux issus du screening des lixiviats sont identifiés.

3. Documents annexés

Les documents annexés au présent rapport sont répertoriés dans le Tableau 3.1.

Titre, contenu	Auteur	Date
GC-MS Screenings: Interpretation der Ergebnisse der Beprobung vom September 2013	Arcadis	14.12.2016
Kommentare Screening Grundwasserproben Bonfol September 2013 und Lixiviatprobe	Prof. Dr. Michael Oehme	25.03.2014

Tableau 3.1 Documents annexés

4. Prochaines campagnes

La convention du 11 janvier 2008 prévoit que bci Betriebs-AG réalise des analyses par screening du lixiviat et de 10 piézomètres une fois par an pendant toute la durée de l'assainissement. La prochaine campagne de prélèvements est prévue en automne 2014.

CSD INGENIEURS SA

Grégoire Monin

Florence Voisard

Porrentruy, le 24 février 2017

W:\MANDATS\Bonfol\JU5206.409\RISER\2013\RISER_37-13_sreening.docx

Pour préserver l'environnement, CSD imprime ses documents sur du papier 100 % recyclé (ISO 14001).

Definitive Sanierung der Sondermülldeponie Bonfol
Projekt: Bonfol Grundwasserüberwachung 61'200.60

Arcadis Schweiz AG
Ifangstrasse 11
CH-8952 Schlieren/Zürich

GC-MS Screenings: Interpretation der Ergebnisse der Beprobung vom September 2013

T +41 44 732 92 92
F +41 44 730 66 22
info-ch@arcadis.com
www.arcadis.com

1 AUSGANGSLAGE UND ZIELSETZUNG

Jährlich werden durch die Firma CSD, Ingenieure und Geologen AG, im Auftrag der bci Betriebs-AG, Grundwasser- und Sickerwasserproben entnommen und zur Analyse auf organische Inhaltstoffe (GC-MS Screening) ins Labor der Arcadis Schweiz AG (ACH) überbracht. Die Analysen der Proben erfolgte nach der von Prof. Dr. M. Oehme (Institut für Angewandte Analytische Chemie, Appenzell, Schweiz) ausgearbeiteten Vorschrift: Screening von Wasserproben (Rev. 2010). Bei dieser Analysenmethode werden hauptsächlich apolare bis schwach polare organische Verbindungen erfasst, die einen Siedepunkt über 140°C haben und mittels massenselektivem Detektor nachgewiesen werden können. Zusätzlich wurde die Bestimmungsgrenze von 0.1 µg/l auf 0.025 µg/l angepasst.

Nachfolgend werden die Ergebnisse der im GC-MS Screening identifizierten Stoffe unter Berücksichtigung der Ergänzungen und Kommentare von Prof. Dr. M. Oehme interpretiert. Die nachgewiesenen Substanzen sind, wie in den Analyseberichten, i.d.R. mit ihrem englischen Namen aufgeführt.

Tab. 1: Probenahme 2013 Grundwasser und Sickerwasser

Datum Probenahme	10.09.2013	
ACH-Auftrag	A13-01687	
Probenliste inkl. ACH-Probennummer	SG19b	M1309-07019
	SG25	M1309-07020
	SG36	M1309-07021
	SG44	M1309-07022
	SG46	M1309-07023
	SG53	M1309-07024
	SG60	M1309-07025
	SG62	M1309-07026
	SG66	M1309-07027
	VG64	M1309-07028
	Lixiviat	M1309-07029
	Blanc	M1309-07030
Kommentare Prof. Dr. M. Oehme	25.03.2014	(siehe Anhang)
Schlussbericht vom	13.02.2015	(siehe Anhang)

2 INTERPRETATION DER ERGEBNISSE

2.1 SG19b (M1309-07019)

Nachgewiesene Substanzen:

- halogenierte Substanzen (trichlorierte Benzole, dichloriertes Anilin, 1,1,2,2-Tetrachloroethane, Tetrachlorethylen, Hexachlorethan)
- Cyclotetrasiloxane, octamethyl-
- Ein subst. Cyclohexanol (nicht beurteilt da unspezifische Angabe)
- Nonanal
- Benzene, 1-methyl-2-nitro-
- Benzene, 1,2,4,5-tetrachloro-
- Benzene, 1-chloro-4-(methylsulfonyl)-
- Tri(2-chloroethyl) phosphate (TCEP)
- Ein Quinolinderivat (nicht beurteilt da unspezifische Angabe)
- Heptabarbital
- 9-Octadecenamide, (Z)-
- Octadecanoic acid, butyl ester

Beurteilung:

Verschiedene der nachgewiesenen halogenierten Substanzen sind auch im Sickerwasser der Deponie Bonfol nachweisbar. Ein Einfluss der Deponie Bonfol auf diese Probe ist sehr wahrscheinlich.

1-Chloro-4-(methylsulfonyl)-benzene findet als chemischer Baustein Anwendung. Tetrachlorbenzole werden unter anderem als Zwischenprodukt zur Herstellung von Herbiziden, Insektiziden, Entlaubungsmitteln und als Imprägniermittel verwendet. TCEP ist ein Phosphorsäureester der als Weichmacher und Viskositätsregulator mit flammhemmenden Eigenschaften Anwendung findet. Zyklische Methylsiloxane finden Anwendung in der Herstellung von Lebensmitteln, als Zusatz für Antischaumbildung sowie Oberflächenbehandlung und in kommerziellen Produkten (Reinigungsmittel, Schmier- und Kriechöle, Klebstoffe, Pflegeprodukte wie Kosmetika) und weisen auf eine anthropogene Belastung des Wassers hin.

2.2 SG25 (M1309-07020)

Nachgewiesene Substanzen:

- Fonofos
- Cyclic octatomic sulfur

Beurteilung:

Octadecansäureester und Schwefel S₈ sind natürlichen (biogenen) Ursprungs. Fonofos ist ein Insektizid der Organothiophosphat-Klasse.

Substanzen, die aus dem Sickerwasser der Deponie Bonfol stammen, können nicht nachgewiesen werden.

2.3 SG36 (M1309-07021)

Nachgewiesene Substanzen:

- Cyclotetrasiloxane, octamethyl-
- Phenol, 2,6-bis(1,1-dimethylethyl)-4-methyl- (Butylhydroxytoluol)
- Benzenesulfonamide, N-butyl-

Beurteilung:

Butylhydroxytoluol wird in verschiedenen Verbraucherprodukten (z. B. Kosmetika oder Verpackungsmaterialien) und auch unter E 321 als zugelassener Lebensmittelzusatzstoff verwendet. Der Stoff Benzolsulfonamid wird als Additiv für Polymere (z.B. Kunstrasen) verwendet. Zyklische Methylsiloxane finden Anwendung in der Herstellung von Lebensmitteln, als Zusatz für Antischaumbildung sowie Oberflächenbehandlung und in kommerziellen Produkten (Reinigungsmittel, Schmier- und Kriechöle, Klebstoffe, Pflegeprodukte wie Kosmetika). Diese Stoffe weisen auf eine anthropogene Belastung des Wassers hin.

Substanzen, die aus dem Sickerwasser der Deponie Bonfol stammen, können nicht nachgewiesen werden.

2.4 SG44 (M1309-07022)

kein Befund

2.5 SG46 (M1309-07023)

Nachgewiesene Substanzen:

- Tetrachloroethylene
- Cyclotetrasiloxan, octamethyl-

Beurteilung:

Zyklische Methylsiloxane finden Anwendung in der Herstellung von Lebensmitteln, als Zusatz für Antischaumbildung sowie Oberflächenbehandlung und in kommerziellen Produkten (Reinigungsmittel, Schmier- und Kriechöle, Klebstoffe, Pflegeprodukte wie Kosmetika) und weisen auf eine anthropogene Belastung des Wassers hin.

Tetrachloroethylen ist auch im Sickerwasser der Deponie Bonfol nachweisbar. Für den Nachweis einer direkten Beeinflussung dieser Probe durch die Deponie Bonfol fehlen allerdings andere im Sickerwasser dominant vorhandene halogenierte Kohlenwasserstoffe und Aniline.

2.6 SG53 (M1309-07024)

Nachgewiesene Substanzen:

- Sulfur S₆
- Benzamide, N,N-diethyl-3-methyl- (DEET)
- Ein Alkan (nicht beurteilt da unspezifische Angabe)
- Eicosane
- Cyclic octatomic sulfur
- Isopropyl Palmitate

Beurteilung:

Isopropylpalmitat, Schwefel S₈ und S₆ sind natürlichen (biogenen) Ursprungs. Eicosane finden als Paraffin verschiedene Anwendungen (z.B. in der Kosmetik). Diethyltoluamid (DEET) ist ein chemisches Repellent (Insektenabwehrmittel).

Substanzen, die aus dem Sickerwasser der Deponie Bonfol stammen, können nicht nachgewiesen werden.

2.7 SG60 (M1309-07025)

Nachgewiesene Substanzen:

- Sulfur S₈
- Isopropyl Palmitate

Beurteilung:

Isopropylpalmitat und Schwefel S₈ sind natürlichen (biogenen) Ursprungs.

Substanzen, die aus dem Sickerwasser der Deponie Bonfol stammen, können nicht nachgewiesen werden.

2.8 SG62 (M1309-07026)

kein Befund

2.9 SG66 (M1309-07027)

Nachgewiesene Substanzen:

- Sulfur S₈
- Isopropyl Palmitate

Beurteilung:

Isopropylpalmitat und Schwefel S₈ sind natürlichen (biogenen) Ursprungs.

Substanzen, die aus dem Sickerwasser der Deponie Bonfol stammen, können nicht nachgewiesen werden.

2.10 VG64 (M1309-07028)

Nachgewiesene Substanzen:

- Nonanoic acid (Pelargonsäure)
- Benzamide, N,N-diethyl-3-methyl- (DEET)
- Sulfur S₈
- Isopropyl Palmitate

Beurteilung:

Isopropylpalmitat und Schwefel S₈ sind natürlichen (biogenen) Ursprungs. Pelargonsäure ist ein natürlicher Stoff welches auch als Herbizid eingesetzt wird. Diethyltoluamid (DEET) ist ein chemisches Repellent (Insektenabwehrmittel).

Substanzen, die aus dem Sickerwasser der Deponie Bonfol stammen, können nicht nachgewiesen werden.

2.11 Lixiviat (M1309-07029)

Die in der Screening Untersuchung nachgewiesenen Substanzen und Substanzklassen entsprechen im Wesentlichen denjenigen Substanzen, die im Rahmen der Grundwasserüberwachung routinemässig überprüft werden (Aniline, Chloraniline, Nitrobenzole). Die nachgewiesenen Gehalte von Anilin (17 – 68 mg/l), Toluidinen (22 – 90 mg/l), Chloranilinen (28 – 114 mg/l) und alkylierten Anilinen (26 – 105 mg/l) entsprechen ca. 54 % der detektierten Signale (total 259 – 1'036 mg/l) in der Probe. Diese Gehalte entsprechen somit auch in der Grössenordnung den Konzentrationen, die bei den regelmässigen Sickerwasseruntersuchungen jeweils bestimmt werden.

Phenol und alkylierte Phenole (47 – 228 mg/l), N-alkylierte Acetamide (24 – 96 mg/l) und ein alkyliertes Formamid (7.5 – 30 mg/l) wurden in hohen Konzentrationen nachgewiesen.

Zusätzlich nachweisbar sind eine Reihe von Herbiziden, Industriechemikalien und Pharmawirkstoffen (ca. 14% der gesamten nachgewiesenen Stoffe) wie:

Benzocain und weitere Benzoessäure-Derivate	6.2 – 25 mg/l
Nikethamide	6.2 – 25 mg/l
3'-Chloro-ortho-acetotoluidide	5.5 – 22 mg/l
α,α -Bis(2-cyanoethyl)benzyl cyanide	5.3 – 21 mg/l
5'-Chloro-2'-methylacetanilide	4.1 – 17 mg/l
Benzonitrile, 3,5-dibromo-4-hydroxy-	3.3 – 13 mg/l
Aminopyrine	3.3 – 13 mg/l
Carbamazepine	1.4 – 5.7 mg/l
Ametryn	1.3 – 5.1 mg/l
Benzamide, 2-chloro-N,N-dimethyl-,	1.2 – 4.7 mg/l
Benzamide, N-phenyl-	1.0 – 4.2 mg/l
[1,1'-Biphenyl]-2-amine	1.0 – 4.0 mg/l
Phenacetin und ein Derivat	0.96 – 3.8 mg/l
Benzonitrile, 2-amino-5-chloro-	0.58 – 2.3 mg/l
Heptabarbital	0.28 – 1.1 mg/l

Von den total 114 nachgewiesenen Signalen konnten 94 (247 – 988 mg/l) identifiziert werden, was 95% des Gesamtgehaltes (259 – 1'036 mg/l) entspricht.

Weitere Substanzen, die im Vergleich zu den routinemässig überwachten Substanzen in allenfalls ökotoxikologisch relevanten Konzentrationen vorhanden sein könnten, wurden nicht identifiziert.

Der Projektleiter

Arcadis Schweiz AG



Dr. Marina Kuster



Dr. Michael Ochs

Schlieren, 14. Dezember 2016

Projekt: Bonfol Grundwasserüberwachung 61'200.60

Arcadis Schweiz AG hat diese Untersuchung unter Einsatz ihres besten professionellen Könnens und in Übereinstimmung mit allgemein anerkannten Grundsätzen ausgeführt. Die Erkenntnisse und Schlussfolgerungen im Untersuchungsbericht stützen sich auf die der Arcadis Schweiz AG zum Zeitpunkt der Berichtverfassung vorliegenden Informationen. Diese Erkenntnisse und Schlussfolgerungen können nicht unüberprüft auf zukünftige Verhältnisse übertragen werden.

bci Betriebs-AG
Rémi Luttenbacher
Klybeckstrasse 141
4002 Basel

Schlieren, 13. Februar 2015

Projekt: Bonfol GW Überwachung
BMG Auftragsnummer: A13-01687
Datum Auftrag: 11. September 2013
Datum Analysen: 11. Sept. - 21. Nov. 2013

Untersuchungsauftrag

Anzahl Proben 12

Parameter	Anz.	Bestimmungsmethode	BMG SAA-Nr
Screening organische Substanzen	12	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).

Dr. Marina Kuster
Bereichsleiterin Analytiklabor

Auftraggeber	bci Betriebs-AG
Projekt	Bonfol GW Überwachung
Auftrag Nr.	A13-01687
Datum Bericht	13.02.2015

Probenbezeichnung	SG19b	SG25	SG36	SG44		
Datum Probenahme	10.09.2013	10.09.2013	10.09.2013	10.09.2013		
Interne Probenbezeichnung	M1309-07019	M1309-07020	M1309-07021	M1309-07022		
Datum Probeneingang	11.09.2013	11.09.2013	11.09.2013	11.09.2013		
Probenart	Grundwasser	Grundwasser	Grundwasser	Grundwasser		
Screening organische Stoffe						
Screening organische Substanzen	siehe Anhang	siehe Anhang	siehe Anhang	siehe Anhang		

Probenbezeichnung	SG46	SG53	SG60	SG62		
Datum Probenahme	10.09.2013	10.09.2013	10.09.2013	10.09.2013		
Interne Probenbezeichnung	M1309-07023	M1309-07024	M1309-07025	M1309-07026		
Datum Probeneingang	11.09.2013	11.09.2013	11.09.2013	11.09.2013		
Probenart	Grundwasser	Grundwasser	Grundwasser	Grundwasser		
Screening organische Stoffe						
Screening organische Substanzen	siehe Anhang	siehe Anhang	siehe Anhang	siehe Anhang		

Probenbezeichnung	SG66	VG64	Lixiviat	BLANC		
Datum Probenahme	10.09.2013	10.09.2013	11.09.2013	10.09.2013		
Interne Probenbezeichnung	M1309-07027	M1309-07028	M1309-07029	M1309-07030		
Datum Probeneingang	11.09.2013	11.09.2013	11.09.2013	11.09.2013		
Probenart	Grundwasser	Grundwasser	Abwasser	Wasser		
Screening organische Stoffe						
Screening organische Substanzen	siehe Anhang	siehe Anhang	siehe Anhang	siehe Anhang		

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. 1'000																		
GC-MS Bedingungen	<table border="0"> <tr> <td>Gaschromatograph:</td> <td>Finnigan: Trace Ultra</td> </tr> <tr> <td>Säule:</td> <td>DB5ms, 30m x 0.25 mm, 0.25 µm</td> </tr> <tr> <td>Injektion:</td> <td>2 µl; Splitless</td> </tr> <tr> <td>Temperaturprogramm:</td> <td>40°C, 2 Min.; 6°C/Min bis 280°C; 10°C bis 300°C; 6 Min.</td> </tr> <tr> <td>Massenselektiver Detektor:</td> <td>Single Quadrupole</td> </tr> <tr> <td>Ionisierung:</td> <td>EI; 70 eV</td> </tr> <tr> <td>Massen:</td> <td>33 - 500 m/z</td> </tr> <tr> <td>Scangeschwindigkeit</td> <td>3 Scans/Sek.</td> </tr> <tr> <td>Bibliothek:</td> <td>NIST 08</td> </tr> </table>	Gaschromatograph:	Finnigan: Trace Ultra	Säule:	DB5ms, 30m x 0.25 mm, 0.25 µm	Injektion:	2 µl; Splitless	Temperaturprogramm:	40°C, 2 Min.; 6°C/Min bis 280°C; 10°C bis 300°C; 6 Min.	Massenselektiver Detektor:	Single Quadrupole	Ionisierung:	EI; 70 eV	Massen:	33 - 500 m/z	Scangeschwindigkeit	3 Scans/Sek.	Bibliothek:	NIST 08
Gaschromatograph:	Finnigan: Trace Ultra																		
Säule:	DB5ms, 30m x 0.25 mm, 0.25 µm																		
Injektion:	2 µl; Splitless																		
Temperaturprogramm:	40°C, 2 Min.; 6°C/Min bis 280°C; 10°C bis 300°C; 6 Min.																		
Massenselektiver Detektor:	Single Quadrupole																		
Ionisierung:	EI; 70 eV																		
Massen:	33 - 500 m/z																		
Scangeschwindigkeit	3 Scans/Sek.																		
Bibliothek:	NIST 08																		

Generelle Bemerkungen zu den Screenings

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.

Auftraggeber
 Projekt
 Auftrag Nr.
 Datum

 bci Betriebs AG
 Bonfol GW Überwachung
 A13-01687
 13.02.2015

Probenbezeichnung: SG 19b				Int. Probennummer: M1309-07019			
Interne Standards							
Nr.	Name des Internen Standards (I.S.)	Konzentration (µg/l)	Wiederfindung (%)	Aufkonzentrierungsfaktor			
a	Anilin d5	1.0	46	1116			
b	Nitrobenzol d5	1.0	81	Bestimmungsgrenze			
c	Naphthalin d8	1.0	83	µg/l			
d	1-Chlorododecan	1.0	90	0.025			
Rot und Kursiv:							
Angaben und Kommentare von Prof. Dr. M. Oehme (Institut für Angewandte Analytische Chemie, Appenzell AI, Schweiz)							
Grün:							
Zusätzlich ausgewertete Signale zwischen 0.025 und 0.10 µg/l							
Summe unbekannte Substanzen							
Anzahl	µg/l (I.S. d)	Bemerkung					
4	0.07 – 0.28						
Summe identifizierte Substanzen							
Anzahl	µg/l (I.S. b/c)	Bemerkung					
19	18 – 72						
Probenbezeichnung: SG 19b				Int. Probennummer: M1309-07019			
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
7	4.28	11 – 42 d	166	Tetrachloroethylene	93	127-18-4	Ok
412	6.52	6.1 – 24 d	83	Ethane, 1,1,2,2-tetrachloro-	94	79-34-5	oder Isomer, Ok
816	8.76	0.08 – 0.32 d	281	Cyclotetrasiloxane, octamethyl-	87	556-67-2	Spuren im Blind enthalten, Ok, allgem. Kontaminante
829	8.83	0.01 – 0.05 d	146 47 49 148	unbekannt			
1131	10.51	0.05 – 0.19 d	49	Ethane, hexachloro-	81	67-72-1	Ok
1161	10.68	0.01 – 0.05 d	49	Ein subst. Cyclohexanol			
1307	11.49	0.02 – 0.07 d	49 41 43 47	unbekannt			
1307	11.49	0.02 – 0.09 d	49	Nonanal	72	124-19-6	
1541	12.79	0.01 – 0.05 b		Benzene, 1-methyl-2-nitro-	72	88-72-2	
1590	13.06	0.17 – 0.68 b	180	Benzene, 1,2,4-trichloro-	87	120-82-1	oder Isomer, Ok
1744	13.91	0.33 – 1.3 b	180	Benzene, 1,2,3-trichloro-	90	87-61-6	oder Isomer, Ok
2211	16.50	0.16 – 0.65 b	216	Benzene, 1,2,4,5-tetrachloro-	88	95-94-3	oder Isomer, Ko-Elution, Ok
2220	16.55	0.03 – 0.11 b	216	Ein Tetrachlorbenzol			
2237	16.65	0.18 – 0.74 b	161	Benzenamine, 3,5-dichloro-	86	626-43-7	oder Isomer, Ko-Elution, Ok
2410	17.61	0.05 – 0.20 b	216	Benzene, 1,2,4,5-tetrachloro-	81	95-94-3	
3014	21.11	–		Benzene, 1-chloro-4-(methylsulfonyl)-	56	98-57-5	Identifikation sicher, kein Signal nachweisbar
3776	25.19	0.15 – 0.61 d	63	Tri(2-chloroethyl) phosphate	88	115-96-8	Ok
4617	29.86	0.11 – 0.45 c	169 115 142 223	Ein Quinolinderivat			
4733	3050	0.018 – 0.07 d	221	Heptabarbital	64	509-86-4	Identifikation sicher
4760	30.65	0.012 – 0.05 d	49 40 178 179	unbekannt			
5196	33.07	0.027 – 0.11 d	185 43 49 259	unbekannt			
5420	34.31	0.06 – 0.23 d	72 41 43 49	9-Octadecenamide, (Z)-	79	301-02-0	Spuren im Blind enthalten, Kontaminante
5485	34.67	0.08 – 0.33 d	43 41 207 285	Octadecanoic acid, butyl ester	85	123-95-5	Spuren im Blind enthalten, Kontaminante

Auftraggeber
 Projekt
 Auftrag Nr.
 Datum

bci Betriebs AG
 Bonfol GW Überwachung
 A13-01687
 13.02.2015

Probenbezeichnung: SG 25				Int. Probennummer: M1309-07020			
Interne Standards							
Nr.	Name des Internen Standards (I.S.)	Konzentration (µg/l)	Wiederfindung (%)	Aufkonzentrierungsfaktor			
a	Anilin d5	1.0	32	1266			
b	Nitrobenzol d5	1.0	76	Bestimmungsgrenze			
c	Naphthalin d8	1.0	72	µg/l			
d	1-Chlorododecan	1.0	81	0.025			
Rot und Kursiv:							
Angaben und Kommentare von Prof. Dr. M. Oehme (Institut für Angewandte Analytische Chemie, Appenzell AI, Schweiz)							
Grün:							
Zusätzlich ausgewertete Signale zwischen 0.025 und 0.10 µg/l							
Summe unbekannte Substanzen							
Anzahl	µg/l (I.S. d)	Bemerkung					
2	0.05 – 0.20						
Summe identifizierte Substanzen							
Anzahl	µg/l (I.S. b/c)	Bemerkung					
2	0.13 – 0.53						
Probenbezeichnung: SG 25				Int. Probennummer: M1309-07020			
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
2832	19.95	0.02 – 0.08 d	192 49 64 128	unbekannt			
3827	25.47	0.06 – 0.23 b	109 49 137 246	Fonofos	78	944-22-9	Verm. aus Landwirtschaft
4536	29.41	0.08 – 0.31 d	64	Cyclic octaatomic sulfur	86	10544-50-0	Ok
5873	36.83	0.03 – 0.12 d	207 49 91 129	unbekannt			

Auftraggeber
 Projekt
 Auftrag Nr.
 Datum

 bci Betriebs AG
 Bonfol GW Überwachung
 A13-01687
 13.02.2015

Probenbezeichnung: SG 36				Int. Probennummer: M1309-07021			
Interne Standards							
Nr.	Name des Internen Standards (I.S.)	Konzentration (µg/l)	Wiederfindung (%)	Aufkonzentrierungsfaktor			
a	Anilin d5	1.0	37	1093			
b	Nitrobenzol d5	1.0	76	Bestimmungsgrenze			
c	Naphthalin d8	1.0	71	µg/l			
d	1-Chlorododecan	1.0	84	0.025			
Rot und Kursiv:							
Angaben und Kommentare von Prof. Dr. M. Oehme (Institut für Angewandte Analytische Chemie, Apenzell AI, Schweiz)							
Grün:							
Zusätzlich ausgewertete Signale zwischen 0.025 und 0.10 µg/l							
Summe unbekannte Substanzen							
Anzahl	µg/l (I.S. d)	Bemerkung					
0	0.00 – 0.00	kein Befund					
Summe identifizierte Substanzen							
Anzahl	µg/l (I.S. b/c)	Bemerkung					
3	1.3 – 5.2						
Probenbezeichnung: SG 36				Int. Probennummer: M1309-07021			
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
818	8.77	0.05 – 0.21 d	49	Cyclotetrasiloxane, octamethyl-	86	556-67-2	Spuren im Blind enthalten, Ok, eine Kontaminante
2936	20.53	0.05 – 0.19 b	205	Phenol, 2,6-bis(1,1-dimethylethyl)-4-methyl-	65/75	128-37-0	Eine Kontaminante, Identifikation gesichert
3827	25.47	1.2 – 4.8 b	170	Benzenesulfonamide, N-butyl-	91	3622-84-2	Ok, generelle Kontaminante, viele Quellen

Auftraggeber
 Projekt
 Auftrag Nr.
 Datum

bci Betriebs AG
 Bonfol GW Überwachung
 A13-01687
 13.02.2015

Probenbezeichnung: SG 44		Int. Probennummer: M1309-07022		
Interne Standards				
Nr.	Name des Internen Standards (I.S.)	Konzentration (µg/l)	Wiederfindung (%)	Aufkonzentrierungsfaktor
a	Anilin d5	1.1	45	909
b	Nitrobenzol d5	1.1	86	Bestimmungsgrenze
c	Naphthalin d8	1.1	86	µg/l
d	1-Chlorododecan	1.1	99	0.025
Rot und Kursiv: Angaben und Kommentare von Prof. Dr. M. Oehme (Institut für Angewandte Analytische Chemie, Appenzell AI, Schweiz)				
Grün: Zusätzlich ausgewertete Signale zwischen 0.025 und 0.10 µg/l				
Summe unbekannte Substanzen				
Anzahl	µg/l (I.S. d)	Bemerkung		
0	0.00 – 0.00	kein Befund		
Summe identifizierte Substanzen				
Anzahl	µg/l (I.S. b/c)	Bemerkung		
0	0.00 – 0.00	kein Befund		

Auftraggeber
Projekt
Auftrag Nr.
Datum

bci Betriebs AG
Bonfol GW Überwachung
A13-01687
13.02.2015

Probenbezeichnung: SG 46				Int. Probennummer: M1309-07023			
Interne Standards							
Nr.	Name des Internen Standards (I.S.)	Konzentration (µg/l)	Wiederfindung (%)	Aufkonzentrierungsfaktor			
a	Anilin d5	1.0	40	1403			
b	Nitrobenzol d5	1.0	88	Bestimmungsgrenze			
c	Naphthalin d8	1.0	85	µg/l			
d	1-Chlorododecan	1.0	98	0.025			
Rot und Kursiv:							
Angaben und Kommentare von Prof. Dr. M. Oehme (Institut für Angewandte Analytische Chemie, Appenzell AI, Schweiz)							
Grün:							
Zusätzlich ausgewertete Signale zwischen 0.025 und 0.10 µg/l							
Summe unbekannte Substanzen							
Anzahl	µg/l (I.S. d)	Bemerkung					
2	0.06 – 0.25						
Summe identifizierte Substanzen							
Anzahl	µg/l (I.S. b/c)	Bemerkung					
2	0.21 – 0.82						
Probenbezeichnung: SG 46				Int. Probennummer: M1309-07023			
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
14	4.32	0.17 – 0.66 d	166	Tetrachloroethylene	87	127-18-4	Ok
819	8.78	0.04 – 0.16 d	49	Cyclotetrasiloxane, octamethyl-	86	556-67-2	
3224	22.13	0.02 – 0.08 d	49 35 40 47	unbekannt			
5485	34.67	0.04 – 0.17 d	49 41 43 285	unbekannt			

Auftraggeber
 Projekt
 Auftrag Nr.
 Datum

 bci Betriebs AG
 Bonfol GW Überwachung
 A13-01687
 13.02.2015

Probenbezeichnung: SG 53		Int. Probennummer: M1309-07024					
Interne Standards							
Nr.	Name des Internen Standards (I.S.)	Konzentration (µg/l)	Wiederfindung (%)	Aufkonzentrierungsfaktor			
a	Anilin d5	1.0	43	1010			
b	Nitrobenzol d5	1.0	80	Bestimmungsgrenze			
c	Naphthalin d8	1.0	78	µg/l			
d	1-Chlorododecan	1.0	89	0.025			
Rot und Kursiv: Angaben und Kommentare von Prof. Dr. M. Oehme (Institut für Angewandte Analytische Chemie, Appenzell AI, Schweiz)							
Grün: Zusätzlich ausgewertete Signale zwischen 0.025 und 0.10 µg/l							
Summe unbekannte Substanzen							
Anzahl	µg/l (I.S. d)	Bemerkung					
1	0.01 - 0.06						
Summe identifizierte Substanzen							
Anzahl	µg/l (I.S. b/c)	Bemerkung					
9	0.70 - 2.8						
Probenbezeichnung: SG 53		Int. Probennummer: M1309-07024					
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
2833	19.96	0.01 - 0.05 d	192	Sulfur S6	64	13798-23-7	
3176	21.86	0.01 - 0.04 b	119	Benzamide, N,N-diethyl-3-methyl-	72	134-62-3	
4184	27.45	0.02 - 0.10 d	43	Ein Alkan			
4472	29.05	0.12 - 0.48 d	71	Eicosane	89	112-95-8	oder Isomer, Ok
4538	29.42	0.06 - 0.26 d	64	Cyclic octaatomic sulfur	89	10544-50-0	Ok
4547	29.47	0.04 - 0.15 d	43	Isopropyl Palmitate	79	142-91-6	
4748	30.58	0.22 - 0.90 d	71	Eicosane	90	112-95-8	oder Isomer, Ok
5013	32.05	0.16 - 0.63 d	71	Eicosane	89	112-95-8	oder Isomer, Ok
5175	32.95	0.01 - 0.06 d	97 41 43 49	unbekannt			
5268	33.47	0.05 - 0.22 d	71	Eicosane	80	112-95-8	oder Isomer, Ok

Auftraggeber
 Projekt
 Auftrag Nr.
 Datum

 bci Betriebs AG
 Bonfol GW Überwachung
 A13-01687
 13.02.2015

Probenbezeichnung: SG 60 Int. Probennummer: **M1309-07025**

Interne Standards				
Nr.	Name des Internen Standards (I.S.)	Konzentration (µg/l)	Wiederfindung (%)	Aufkonzentrierungsfaktor
a	Anilin d5	1.0	39	1006
b	Nitrobenzol d5	1.0	74	Bestimmungsgrenze
c	Naphthalin d8	1.0	73	µg/l
d	1-Chlorododecan	1.0	83	0.025

Rot und Kursiv:

Angaben und Kommentare von Prof. Dr. M. Oehme (Institut für Angewandte Analytische Chemie, Appenzel AI, Schweiz)

Grün:

Zusätzlich ausgewertete Signale zwischen 0.025 und 0.10 µg/l

Summe unbekannte Substanzen		
Anzahl	µg/l (I.S. d)	Bemerkung
0	0.00 - 0.00	kein Befund

Summe identifizierte Substanzen		
Anzahl	µg/l (I.S. b/c)	Bemerkung
2	0.03 - 0.12	

Probenbezeichnung: SG 60 Int. Probennummer: **M1309-07025**

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
4540	29.43	0.01 - 0.02 d	86	Sulfur S8	62	7704-34-9	
4547	29.47	0.02 - 0.09 d	43	Isopropyl Palmitate	80	142-91-6	

Auftraggeber
 Projekt
 Auftrag Nr.
 Datum

bci Betriebs AG
 Bonfol GW Überwachung
 A13-01687
 13.02.2015

Probenbezeichnung: SG 62			Int. Probennummer: M1309-07026	
Interne Standards				
Nr.	Name des Internen Standards (I.S.)	Konzentration (µg/l)	Wiederfindung (%)	Aufkonzentrierungsfaktor
a	Anilin d5	1.1	36	950
b	Nitrobenzol d5	1.1	77	Bestimmungsgrenze
c	Naphthalin d8	1.1	102	µg/l
d	1-Chlorododecan	1.1	72	0.025
Rot und Kursiv: Angaben und Kommentare von Prof. Dr. M. Oehme (Institut für Angewandte Analytische Chemie, Appenzell AI, Schweiz)				
Grün: Zusätzlich ausgewertete Signale zwischen 0.025 und 0.10 µg/l				
Summe unbekannte Substanzen				
Anzahl	µg/l (I.S. d)	Bemerkung		
0	0.00 – 0.00	kein Befund		
Summe identifizierte Substanzen				
Anzahl	µg/l (I.S. b/c)	Bemerkung		
0	0.00 – 0.00	kein Befund		

Auftraggeber
 Projekt
 Auftrag Nr.
 Datum

bci Betriebs AG
 Bonfol GW Überwachung
 A13-01687
 13.02.2015

Probenbezeichnung: SG 66 Int. Probennummer: **M1309-07027**

Interne Standards				
Nr.	Name des Internen Standards (I.S.)	Konzentration (µg/l)	Wiederfindung (%)	Aufkonzentrierungsfaktor
a	Anilin d5	1.1	39	1353
b	Nitrobenzol d5	1.1	74	Bestimmungsgrenze
c	Naphthalin d8	1.1	68	µg/l
d	1-Chlorododecan	1.1	86	0.025

Rot und Kursiv:

Angaben und Kommentare von Prof. Dr. M. Oehme (Institut für Angewandte Analytische Chemie, Appenzell AI, Schweiz)

Grün:

Zusätzlich ausgewertete Signale zwischen 0.025 und 0.10 µg/l

Summe unbekannt Substanzen		
Anzahl	µg/l (I.S. d)	Bemerkung
0	0.00 - 0.00	kein Befund

Summe identifizierte Substanzen		
Anzahl	µg/l (I.S. b/c)	Bemerkung
1	0.01 - 0.05	

Probenbezeichnung: SG 66 Int. Probennummer: **M1309-07027**

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
3177	21.86	0.01 - 0.05 b	119	Benzamide, N,N-diethyl-3-methyl-	62	134-62-3	Identifizierung gesichert

Auftraggeber
Projekt
Auftrag Nr.
Datum

bci Betriebs AG
Bonfol GW Überwachung
A13-01687
13.02.2015

Probenbezeichnung: VG 64				Int. Probennummer: M1309-07028			
Interne Standards							
Nr.	Name des Internen Standards (I.S.)	Konzentration (µg/l)	Wiederfindung (%)	Aufkonzentrierungsfaktor			
a	Anilin d5	1.1	36	1350			
b	Nitrobenzol d5	1.1	77	Bestimmungsgrenze			
c	Naphthalin d8	1.1	68	µg/l			
d	1-Chlorododecan	1.1	81	0.025			
Rot und Kursiv: Angaben und Kommentare von Prof. Dr. M. Oehme (Institut für Angewandte Analytische Chemie, Appenzell AI, Schweiz)							
Grün: Zusätzlich ausgewertete Signale zwischen 0.025 und 0.10 µg/l							
Summe unbekannte Substanzen							
Anzahl	µg/l (I.S. d)	Bemerkung					
1	0.06 – 0.25						
Summe identifizierte Substanzen							
Anzahl	µg/l (I.S. b/c)	Bemerkung					
4	0.08 – 0.32						
Probenbezeichnung: VG 64				Int. Probennummer: M1309-07028			
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
108	4.83	0.06 – 0.25 d	49 41 43 47	unbekannt			Vermutlich ein Pentenon oder Isomer
2012	15.4	0.04 – 0.15 d	60	Nonanoic acid	84	112-05-0	
3177	21.86	0.01 – 0.05 b	119	Benzamide, N,N-diethyl-3-methyl-	624	134-62-3	Identifizierung gesichert
4536	29.41	0.01 – 0.06 d	64	Sulfur S8	65	7704-34-9	
4544	29.45	0.02 – 0.07 d	43	Isopropyl Palmitate	79	142-91-6	

Auftraggeber
 Projekt
 Auftrag Nr.
 Datum

 bci Betriebs AG
 Bonfol GW Überwachung
 A13-01687
 13.02.2015

Probenbezeichnung: Lixiviat				Int. Probennummer: M1309-07029			
Interne Standards							
Nr.	Name des Internen Standards (I.S.)	Konzentration (mg/l)	Wiederfindung (%)	Aufkonzentrierungsfaktor			
a	Anilin d5	2.0	34	0.56			
b	Nitrobenzol d5	2.0	89	Bestimmungsgrenze			
c	Naphthalin d8	2.0	84	mg/l			
d	1-Chlorododecan	2.0	99	0.20			
Rot und Kursiv:							
Angaben und Kommentare von Prof. Dr. M. Oehme (Institut für Angewandte Analytische Chemie, Appenzell AI, Schweiz)							
Summe unbekannt Substanzen							
Anzahl	mg/l (I.S. d)	Bemerkung					
20	12 - 48						
Summe identifizierte Substanzen							
Anzahl	mg/l (I.S. b/c)	Bemerkung					
94	247 - 988						
Probenbezeichnung: Lixiviat				Int. Probennummer: M1309-07029			
Nachgewiesene Substanzen							
Scan	RT (Min.)	mg/l (I.S. b/c/d)	Massen m/z (fett = Basispeak)	Name, Trivialname oder IUPAC	% Fit	CAS-Nr.	Bemerkungen
14	4.32	0.68 - 2.7 d	166	Tetrachloroethylene	93	127-18-4	Ok
151	5.07	4.3 - 17 b	112	Benzene, chloro-	92	108-90-7	Ok
219	5.45	0.34 - 1.4 b	49 47 91 106	Ethylbenzol	84		
250	5.62	1.2 - 4.6 b	91	p-Xylene	91	106-42-3	Oder Isomer
308	5.94	0.19 - 0.75 d	49	1-Ethynylcyclopentanol	84	17356-19-3	Ok
322	6.02	0.11 - 0.44 d	49 57 67 82	unbekannt		1618-26-4, 108-93-0	Ko-Elution von Dithiapentane und Cyclohexanol
347	6.16	0.09 - 0.37 d	49 47 91 106	unbekannt			Nicht identifizierbar
427	6.60	0.59 - 2.3 d	83	Ethane, 1,1,2,2-tetrachloro-	91	79-34-5	Ok
720	8.23	17 - 66 a	93	Aniline	95	62-53-3	Ok
752	8.41	26 - 103 b	94	Phenol	92	108-95-2	Ok
960	9.56	2.4 - 9.5 b	146	Benzene, 1,3-dichloro-	95	541-73-1	oder Isomer, Ok
980	9.67	0.66 - 2.7 b	79	Benzyl alkohole	97	100-51-6	
1076	10.21	4.9 - 19 b	108	Phenol, 2-methyl-	92	95-48-7	oder Isomer, Ok
1112	10.41	1.7 - 6.9 b	106	Aniline, N-methyl-	93	100-61-8	Ok
1135	10.53	11 - 45 b	106	o-Toluidine	95	95-53-4	oder Isomer, Ko-elution, Ok
1141	10.57	11 - 45 b	106	p-Toluidine oder Isomer	98	106-49-0	
1172	10.74	6.8 - 27 b	107	Phenol, 3-methyl-	88	108-39-4	oder Isomer, Ok
1202	10.90	3.1 - 12 b	77	Benzene, nitro-	88	98-95-3	Ok
1220	11.00	1.1 - 4.5 b	120	Benzenamine, N,N-dimethyl-	89	121-69-7	Ok
1235	11.09	0.17 - 0.67 d	45	Ethane, 1,1'-oxybis[2-ethoxy-	84	112-36-7	
1247	12.26	0.24 - 0.95 b	117	Benzyl nitrile	83	140-29-4	
1386	11.93	4.5 - 18 b	127	m-Chloroaniline	91	108-42-9	oder Isomer, Ok
1399	12.00	2.7 - 11 b	106 73 77 121	Benzenamine, 2-ethyl-,	77		oder Isomer
1487	12.49	1.4 - 5.5 b	122	Phenol, 3,4-dimethyl-	88	95-65-8	oder Isomer, Ok
1493	12.52	0.49 - 2.0 b	122	Phenol, 2,6-dimethyl-	85	576-26-1	oder Isomer, Ok
1513	12.63	1.4 - 5.4 b	106 49 77 121	Benzenamine 2-ethyl,	89	578-54-1	oder Isomer
1535	12.75	0.84 - 3.4 b	120	Benzene, 1-methyl-2-nitro-	82	88-72-2	oder Isomer, Ok
1556	12.87	2.0 - 7.9 b	121 106 120 162	Benzenamine, 2,4-dimethyl,	80	95-68-1	oder Isomer
1570	12.95	0.48 - 1.9 b	107 77 105 122	Phenol, 3,4-dimethyl-	80		oder Isomer
1579	13.00	4.8 - 19 b	122	Phenol, 2,3-dimethyl-	82	526-75-0	oder Isomer, Ok
1617	13.21	0.91 - 3.6 c	128 77 105 122	Naphthalene	86	91-20-3	
1672	13.51	0.35 - 1.4 d	59	3-Cyclohexene-1-methanol, trimethyl-	84	98-55-5	Ok
1680	13.56	1.4 - 5.7 b	107	Phenol, 3,4-dimethyl-	82	95-65-8	oder Isomer, Ok
1696	13.65	7.5 - 30 b	127	p-Chloroaniline	95	106-47-8	oder Isomer, Ok

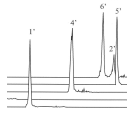
Probenbezeichnung: Lixiviat				Int. Probennummer: M1309-07029			
Nachgewiesene Substanzen							
Scan	RT (Min.)	mg/l (I.S. b/c/d)	Massen m/z (fett = Basispeak)	Name, Trivialname oder IUPAC	% Fit	CAS-Nr.	Bemerkungen
1712	13.73	1.2 – 4.8 b	127	p-Chloroaniline	85	106-47-8	oder Isomer, Ok
1771	14.06	0.80 – 3.2 d	150 79 107 122	2,5-Cyclohexadiene-1,4-dione, 2,3,5-trimethyl-	76	935-92-2	(Wiley9)
1811	14.28	0.95 – 3.8 b	134	Benzenamine, N,N-diethyl-	87	91-66-7	Ok
1844	14.47	1.2 – 4.9 b	139	Ethanone, 1-(4-chlorophenyl)-	85	99-91-2	Ok
1857	14.54	0.17 – 0.66 c	129	Isoquinoline	93	119-65-3	oder Isomer, Ok
1869	14.61	2.6 – 10 b	108 80 109 137	Benzenamine, 2-ethoxy-		94-70-2	oder Isomer
1942	15.01	12 – 49 b	135	Benzenamine, 2,4,5-trimethyl-	95	137-17-7	oder Isomer, Ok
2028	15.49	0.88 – 3.5 b	91 49 119 136	Benzoic acid, 3-methyl-	77	99-04-7	(Wiley9), oder Isomer
2077	15.76	1.6 – 6.3 b	141	Benzenamine, 3-chloro-2-methyl-	89	87-60-5	oder Isomer, Ok
2099	15.88	0.72 – 2.9 b	135	Phenol, m-tert-butyl-	91	585-34-2	
2106	15.92	1.4 – 5.5 b	141	Benzenamine, 4-chloro-2-methyl-	84	95-69-2	oder Isomer, Ko-elution, Ok
2157	16.20	0.08 – 0.33 c	143 41 49 115	Quinoline, 4-methyl-	74	491-35-0	(Wiley9), oder Isomer
2204	16.47	7.5 – 30 b	121	Formamide, N-phenyl-	87	103-70-8	oder Isomer, Ok
2232	16.62	9.7 – 39 b	161	Benzenamine, 2,5-dichloro-	94	95-82-9	oder Isomer, Ok
2288	16.93	3.3 – 13 b	139	Benzoic acid, 2-chloro-	81	118-91-2	oder Isomer, Ok
2313	17.07	2.1 – 8.4 b	161	Benzenamine, 3,5-dichloro-	87	626-43-7	oder Isomer, Ok
2402	17.56	0.41 – 1.7 d	60 41 49 129	Decanoic acid			Spuren im Blind enthalten
2438	17.76	12 – 48 b	93	Acetamide, N-phenyl-	93	103-84-4	Ok
2502	18.12	0.63 – 2.5 b	135	Phenol, 4-(1,1-dimethylpropyl)-	85	80-46-6	Ok
2515	18.19	0.19 – 0.75 c	117	Quinoxaline, 2,3-dimethyl-	89	2379-55-7	Ok
2551	18.39	0.20 – 0.78 d	145 49 106 113	unbekannt			Ko-Elution mehrerer Verb.
2581	18.56	1.6 – 6.5 b	134	Benzenamine, N,2,4,6-tetramethyl-	83	13021-14-2	oder Isomer, Ok
2598	18.65	0.85 – 3.4 b	106	4-Methylformanilide	88	3085-54-9	Ok
2608	18.71	1.3 – 5.3 b	106	Acetamide, N-(2-methylphenyl)-	82	120-66-1	oder Isomer, Ok
2621	18.78	0.35 – 1.4 b	161	Benzenamine, 3,4-dichloro oder Isomer	92	95-76-1	
2689	19.16	0.11 – 0.46 d	107 49 106 121	unbekannt			Ko-Elution von Isobutyramide, N-methyl-N-phenyl- und unbekannt
2712	19.28	3.1 – 12 b	134	Ethanol, 2-(ethylphenylamino)-	89	92-50-2	Ok
2811	19.83	4.0 – 16 d	131 41 113 143	unbekannt			Vermutlich 1-(5,5-DIMETHYL-4,5-DIHYDRO-1,3-THIAZOL-2-YL)PIPERAZINE (Wiley9), bibliotheksspektrum schlecht.
2827	19.92	8.7 – 35 b	106	Acetamide, N-(4-methylphenyl)-	83	103-89-9	Ok
2855	20.08	0.44 – 1.8 b	106 49 77 146	Propanenitrile, 3-(phenylamino)-	83	1075-76-9	
2905	20.36	0.23 – 0.94 d	92 107 121 122	unbekannt			Nicht identifizierbar
2927	20.48	0.15 – 0.58 d	152 49 59 137	unbekannt			Ko-elution, Ok
2953	20.62	0.42 – 1.7 d	144 115 116 145	unbekannt		135-19-3	Ko-Elution von 2-Naphthalenol und Benzoic acid, 2,6-dichloro (oder isomer)
2996	20.86	2.0 – 7.8 b	108	Acetamide, N-(2-methoxyphenyl)-	86	93-26-5	Ok
3030	21.05	0.78 – 3.1 b	111	Benzene, 1-chloro-4-(methylsulfonyl)-	89	98-57-7	Ok
3037	21.09	6.2 – 25 b	106	Nikethamide	85	59-26-7	Ok
3056	21.19	1.2 – 4.7 b	139 111 141 182	Benzenamide, 2-chloro-N,N-dimethyl-,	83	6526-67-6	
3150	21.72	0.59 – 2.3 b	108 109 137 179	Phenacetinderivat	77		
3161	21.77	0.47 – 1.9 b	120	Benzocaine	82	94-09-7	Ok
3195	21.96	1.0 – 4.0 b	169 127 167 168	[1,1'-Biphenyl]-2-amine	84	90-41-5	
3239	22.21	0.58 – 2.3 b	152 49 90 154	Benzonitrile, 2-amino-5-chloro-			und Benzenamine, 4-chloro-2-nitro- (oder Isomer)
3282	22.45	5.5 – 22 b	141	3'-Chloro-ortho-acetotoluidide	95	7463-35-6	oder Isomer, Ok
3325	22.69	0.37 – 1.5 d	141 77 105 106	unbekannt			Isomer zu Scan 3282
3356	22.86	4.1 – 17 b	141	5'-Chloro-2'-methylacetanilide	91	5900-55-0	oder Isomer, Ok
3372	22.95	0.25 – 0.98 d	91 105 115 147	Alkylsubst. benzene (branched chain)			kommt auch in anderen Deponien vor

Probenbezeichnung: Lixiviat				Int. Probennummer: M1309-07029			
Nachgewiesene Substanzen							
Scan	RT (Min.)	mg/l (I.S. b/c/d)	Massen m/z (fett = Basispeak)	Name, Trivialname oder IUPAC	% Fit	CAS-Nr.	Bemerkungen
3388	23.04	0.13 – 0.52 d	72 44 49 232	Lanex		2164-17-2	
3438	23.31	0.24 – 0.95 d	151 106 134 193	unbekannt			Nicht identifizierbar
3476	23.52	3.3 – 13 b	277	Benzonitrile, 3,5-dibromo-4-hydroxy-	89	1689-84-5	Ok
3501	23.66	0.58 – 2.3 b	142 77 107 141	Propanoic acid, 2-(4-chloro-2-methylphenoxy)-	78	7085-19-0	
3522	23.78	0.25 – 0.98 d	168 41 124 167	Butalbital	85	77-26-9	
3589	24.15	0.37 – 1.48 b	108 109 137 179	Phenacetin	83	581-08-8	
3638	24.42	1.40 – 5.60 b	188	1-Benzoylpiperidine	86	776-75-0	Ok
3710	24.82	0.40 – 1.60 d	93 43 94 135	unbekannt			Zu wenig Info im MS
3733	24.95	0.13 – 0.52 d	168 49 138 210	unbekannt			Nicht identifizierbar
3788	25.26	0.192 – 0.768 b	169	1,3,5-Triazine-2,4-diamine, N-(1,1-dimethylethyl)-N'-ethyl-6-methoxy-	79	33693-04-8	
3904	25.94	0.54 – 2.2 b	193 164 165 195	1-phenyl-3-methyl-4-hydroxy-4-(prop-2-yl)-2,5-dihydropyrazole-5-one		Nicht gefunden	(wiley9)
3910	25.93	0.10 – 0.40 c	193 77 165 195	6-Chloro-4-hydroxy-2-methylquinoline	79	15644-86-7	oder Isomer
3961	26.22	0.37 – 1.5 b	196 49 169 210	Etazin		26259-45-0	(Wiley9)
4028	26.59	0.97 – 3.9 d	136 154 182 183	unbekannt			Nicht identifizierbar, kommt auch in anderen Deponien vor
4091	26.94	3.0 – 12 b	189 117 132 149	Homolog zu 3-ethyl-3-phenyl-2,6-piperidinedione		77-21-4	auch in anderen Deponien
4132	27.16	0.17 – 0.70 d	163 49 135 178	unbekannt			Nicht identifizierbar
4221	27.66	1.4 – 5.4 d	202 77 110 201	unbekannt			Nicht identifizierbar, kommt auch in anderen Deponien vor
4231	27.71	1.3 – 5.1 b	227	Ametryn	88	834-12-8	Ok
4291	28.05	0.12 – 0.50 d	97 41 49 99	unbekannt			Nicht identifizierbar
4313	28.17	3.3 – 13 b	231	Aminopyrine	93	58-15-1	Ok
4349	28.37	1.0 – 4.2 b	105	Benzamide, N-phenyl-	89	93-98-1	Ok
4383	28.56	1.8 – 7.2 d	193 164 165 166	unbekannt			Aromatisch, N-haltig, auch in anderen Deponien
4433	28.83	0.16 – 0.64 d	136 108 135 182	unbekannt			Nicht identifizierbar
4465	29.01	0.94 – 3.8 b	263	3,5-di-tert-Butyl-4-hydroxyphenylpropionic acid	88	20170-32-5	Ok
4620	29.87	5.3 – 21 b	169 115 129 142	α,α -Bis(2-cyanoethyl)benzyl cyanide		Nicht gefunden	(Wiley9) oder Isomer, schlechtes Bibliotheks-MS
4735	30.51	0.28 – 1.1 d	221 130 141 144	Heptabarbital		509-86-4	Ko-Elution
4787	30.80	0.37 – 1.5 b	195	5H-Dibenz[b,f]azepine, 10,11-dihydro-	81	494-19-9	Nein, ein anderes Dibenzazepinderivat
4865	31.23	0.11 – 0.43 d	144 49 130 145	unbekannt			Ok
4980	31.87	0.16 – 0.63 d	41	Hexadecanoic acid, butyl ester	82	111-06-8	auch in Blind enthalten, Ok
5123	32.66	0.31 – 1.3 b	122	2-Methoxyaniline-5-sulfonic acid diethylamide	89	97-35-8	Ok
5198	33.08	1.5 – 6.0 b	139	Benzoic acid, 2-(4-chlorobenzoyl)-	82	85-56-3	Ok
5280	33.54	0.86 – 3.5 d	190 162 191 236	unbekannt			Nicht identifizierbar, kommt auch in anderen Deponien vor
5387	34.13	0.33 – 1.3 b	173	1H-1,2,4-Triazole, 1-[[2-(2,4-dichlorophenyl)-4-propyl-1,3-dioxolan-2-yl]methyl]-	84	60207-90-1	Ok
5420	34.31	1.4 – 5.7 b	193 191 192 236	Carbamazepine	80		
5812	36.49	0.08 – 0.33 c	277	Triphenylphosphine oxide	87	791-28-6	Ok

Auftraggeber
Projekt
Auftrag Nr.
Datum

bci Betriebs AG
Bonfol GW Überwachung
A13-01687
13.02.2015

Probenbezeichnung: BLANC				Int. Probennummer: M1309-07030			
Interne Standards							
Nr.	Name des Internen Standards (I.S.)	Konzentration (µg/l)	Wiederfindung (%)	Aufkonzentrierungsfaktor			
a	Anilin d5	1.0	47	1012			
b	Nitrobenzol d5	1.0	95	Bestimmungsgrenze			
c	Naphthalin d8	1.0	84	µg/l			
d	1-Chlorododecan	1.0	101	0.03			
Rot und Kursiv: Angaben und Kommentare von Prof. Dr. M. Oehme (Institut für Angewandte Analytische Chemie, Appenzell AI, Schweiz)							
Grün: Zusätzlich ausgewertete Signale zwischen 0.025 und 0.10 µg/l							
Summe unbekannt Substanzen							
Anzahl	µg/l (I.S. d)	Bemerkung					
2	0.05 – 0.18						
Summe identifizierte Substanzen							
Anzahl	µg/l (I.S. b/c)	Bemerkung					
1	0.03 – 0.11						
Probenbezeichnung: BLANC				Int. Probennummer: M1309-07030			
Nachgewiesene Substanzen							
Scan	RT (Min.)	mg/l (I.S. b/c/d)	Massen m/z (fett = Basispeak)	Name, Trivialname oder IUPAC	% Fit	CAS-Nr.	Bemerkungen
2936	20.53	0.02 – 0.10 d	191 36 40 49	unbekannt			
3229	22.15	0.02 – 0.08 d	49 41 43 149	unbekannt			
4244	27.79	0.03 – 0.11 d	205	7,9-Di-tert-butyl-1-oxaspiro(4,5)deca-6,9-diene-2,8-dione	74	82304-66-3	Typische Kontaminante, Verschluss Mineralwasserflasche



AAC

INSTITUT FÜR ANGEWANDTE ANALYTISCHE
CHEMIE
PROF. DR. MICHAEL OEHME

WEITERBILDUNG UND BERATUNG IN ANALYTISCHER CHEMIE

Herr Rémi Luttenbacher
BCI Betriebs-AG
c/o Ciba AG
Klybeckstr. 141
Postfach
4002 Basel

IHRE REF. :

UNSERE REF. :
2014-1035

APPENZEL AI,
25. März 2014

Kommentare Screening Grundwasserproben Bonfol September 2013 und Lixiviatprobe

Sehr geehrter Herr Luttenbacher,

beiliegend sende ich Ihnen meine Kommentare zu den Screenings der Grundwasserproben vom 11. September 2013 sowie der Lixiviatprobe. Ich habe die Identifikationen nachgeprüft und soweit möglich bei den Unbekannten weitere Abklärungen vorgenommen. Dabei ist mir aufgefallen, dass die Screening nur bis zu einer Grenze von 0,1 µg/l ausgewertet wurden. Das ist höher als früher. Bereits 2013 hatte ich folgende Anmerkung gemacht: „...bin ich auch unter die standardmässig gesetzte Grenze der BMG von ca. 50 ng/L gegangen, da die Proben (Ausnahme Lixiviat) sehr sauber waren und eine niedrigere Identifikationsgrenze erlaubten. Damit ist es auch möglich, den Erfolg der Sanierung auch im Spurenbereich weiter zu verfolgen, was im allgemeinen Interesse sein sollte. Bei weiteren Fortschritten sollte man in Zukunft die Probenextrakte vielleicht noch einen Faktor 2 weiter einengen und so Auswertegrenzen um 25 ng/L ermöglichen.“ Ich sehe keine Sinn bei einer Auswertegrenze von 0,1 µg/l in Zukunft Screenings zu überprüfen.

Die Qualität der Trennungen und der Massenspektren ist gut bis sehr gut, auch die Lixiviatprobe. Die Auswertung ist generell recht gut bis gut. Es wurden jedoch gelegentlich deutlich sichtbare GC-Signale nicht berücksichtigt, wobei diese auch über der bisherigen Auswertegrenze von 50 ng/l liegen dürften.

ADRESSE :
AAC
SONNENHALBSTR. 57
CH-9050 APPENZEL AI
SCHWEIZ

TEL : INT: +41-71-797 02 11
FAX : INT: +41-71-797 02 12
MOBIL : INT: +41-79-358 20 10
E-MAIL : MICHAEL.OEHME@UNIBAS.CH

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

In der Lixiviatprobe wurden einige gut sichtbare Signale nicht aufgeführt, was bei der Vielfalt der Substanzen schnell passieren kann, sowie einige Substanzen nicht korrekt identifiziert, was bei einer automatisierten Auswertung normal ist. Ich habe darauf verzichtet, die Liste zu komplettieren und habe nur zusätzliche Substanzen aufgeführt, wo dies augenfällig war.

Ich weise nochmals darauf hin, dass alle Identifikationen tentativ sind, solange diese nicht mit Referenzverbindungen bestätigt worden sind. Bitte beachten Sie auch, dass dieser Bericht dem endgültigen Analysenbericht als Anhang beigefügt werden muss, so dass dadurch ersichtlich wird, was abgeändert worden ist.

Generelle Anmerkungen:

- Es tritt im Gegensatz zu früher nur noch ganz sporadisch in den Proben und im Feldblindwert die Substanz Benzophenon auf. Die Laborkontamination scheint also auf dem Rückzug zu sein.
- Es treten in den Proben gelegentlich Kontaminanten auf (langkettige Säuren und Amide, N-Butylbenz-sulfonamid etc.), welche aus Polymeren stammen und vermutlich ihren Ursprung in den fest montierten Pumpen oder Absperrhähnen.
- Bis auf Anilin-D5 liegen die Wiederfindungen der zugesetzten internen Extraktionsstandard innerhalb der verlangten Bereichs von 50-100%. Für das polare Anilin-D5 wurden ca. 32-47% wiedergefunden, was wesentlich besser als früher ist. Ich hatte bereits 2012 angemerkt, dass zwei neue interne Standards eingesetzt werden sollen (damals 2,6-Dimethyl-D6-anilin und -phenol). Es hat sich in der Zwischenzeit gezeigt, dass N,N-dimethyl-d6-phenol noch besser geeignet ist. Beide Substanzen werden in mein QS-Konzept aufgenommen, das Anilin-d5 entfällt. Darf ich Sie bitten, diese interne Standards ab jetzt einzusetzen.
- Ich habe die Anmerkung „oder Isomer“ dort ergänzt, wo z.B. die Position am Aromaten nicht eindeutig ist. Es gibt auch Substitutionen, die eindeutig sind (durch „ortho-Effekt oder Umlagerungen“).
- Die Lixiviatprobe enthielt wiederum eine grosse Anzahl von Verbindungen (2013: >119, 2012: >120, 2011: 140, 2010: 61). Dies macht die Auswertung auch durch teilweise Störungen weiterhin aufwändig. Ich habe daher verzichtet noch weitere Verbindungen in die Liste aufzunehmen, welche die automatisierte Auswertung übergangen hat. Dies macht erst Sinn, wenn die Gesamtbelastung zurückgeht. Mit einem grösseren Zeitaufwand könnten einige der jetzt als „nicht identifizierbar“ eingestuft Verbindungen wohl teilweise oder vollständig identifiziert werden. Ich habe dies aus Kosten/Nutzengründen unterlassen.

Alle weiteren Anmerkungen habe ich in den Tabellen aufgeführt. Dort verwendete Abkürzungen sind wie folgt:

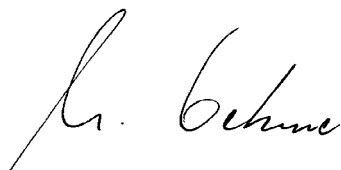
F/RF: Übereinstimmung der Suchfunktionen „fit“ und „retrofit“ im Modus „similarity“ verwendeten Vergleichsprogramms. Das Maximum ist 1000.

#: Scannummer

Int.: Interferenz

Für Fragen und Präzisierungen stehe ich jederzeit zur Verfügung.

Mit freundlichen Grüßen:



Prof. Dr. Michael Oehme