



im Landesamt für Umwelt, Wasserwirtschaft  
und Gewerbeaufsicht Rheinland-Pfalz

## **Tätigkeitsbericht 2002/03**

### **Ergänzung zu Teil 1**

### **GC/MS-Screening**

Baden-Württemberg



Hessen



Rheinland-Pfalz







im Landesamt für Umwelt, Wasserwirtschaft  
und Gewerbeaufsicht Rheinland-Pfalz

## Tätigkeitsbericht 2002/03

### Ergänzung zu Teil 1

## GC/MS-Screening

Bearbeiter:

**Dipl.-Ing. (FH) Anke Lauer**  
Dipl.-Biol. Dr. Peter Diehl

02.2006

Worms, Januar 2006

Die in diesem Bericht präsentierten Messdaten und Diagramme werden auch wieder auf einer CD-ROM zur Verfügung gestellt, die Interessierte bei der Rheingütestation Worms anfordern können.

Rheingütestation Worms  
im Landesamt für Umwelt, Wasserwirtschaft  
und Gewerbeaufsicht Rheinland-Pfalz  
Am Rhein 1  
67547 Worms

Tel.: 06241/92111-0  
Fax.: 06241/92111-49  
e-Mail: [rgs.worms@luwg.rlp.de](mailto:rgs.worms@luwg.rlp.de)

# INHALT

	<b>Seite</b>
<b>1 EINFÜHRUNG</b>	<b>1</b>
<b>2 METHODE</b>	<b>1</b>
<b>2.1 GC/MS-Screening an den Messwasserleitungen 1 und 4</b>	<b>1</b>
<b>2.2 Kurzbeschreibung der Methoden</b>	<b>2</b>
2.2.1 Aktuelle Screening-Methode an der Messwasserleitung 1	2
2.2.2 Aktuelle Screening-Methode an der Messwasserleitung 4	2
<b>3 ERGEBNISSE</b>	<b>3</b>
<b>3.1 Allgemeine Aussagen</b>	<b>3</b>
<b>3.2 Stoffspezifische Aussagen</b>	<b>6</b>
3.2.1 Industriechemikalien	6
3.2.2 Pflanzenschutzmittel	6
3.2.3 Arzneimittelwirkstoffe	7
3.2.4 Duftstoffe	8
3.2.5 Flammschutzmittel	8
3.2.6 Weichmacher	9
3.2.7 Kunststoffadditive	9
<b>3.3 Vergleich des GC/MS-Screenings mit dem routinemäßigen Messprogramm auf organische Spurenstoffe</b>	<b>10</b>
<b>Anhang 1</b>	
<b>1.1 Messwasserleitung 1 2002</b>	
1.1.1 Jahresübersicht der Auffälligkeiten an MWL1 2002	
1.1.2 Stoffliste der detektierten Stoffe an MWL 1 2002	
1.1.3 Konzentrationsverläufe der Auffälligkeiten an MWL 1 2002	
<b>1.2 Messwasserleitung 4 2002</b>	
1.2.1 Jahresübersicht der Auffälligkeiten an MWL 4 2002	
1.2.2 Stoffliste der detektierten Stoffe an MWL 4 2002	
1.2.3 Konzentrationsverläufe der Auffälligkeiten an MWL 4 2002	

- Anhang 2**
- 2.1 Messwasserleitung 1 2003**
    - 2.1.1 Jahresübersicht der Auffälligkeiten an MWL 1 2003
    - 2.1.2 Stoffliste der detektierten Stoffe an MWL 1 2003
    - 2.1.3 Konzentrationsverläufe der Auffälligkeiten an MWL 1 2003
  
  - 2.2 Messwasserleitung 4 2003**
    - 2.2.1 Jahresübersicht der Auffälligkeiten an MWL 4 2003
    - 2.2.2 Stoffliste der detektierten Stoffe an MWL 4 2003
    - 2.2.3 Konzentrationsverläufe der Auffälligkeiten an MWL 4 2003
- Anhang 3**
- 3.1 Übersicht über das wiederholte Auftreten von Stoffen im GC/MS-Screening 1997 - 2003**
    - 3.1.1 Identifizierte Substanzen
    - 3.1.2 Substanzen aus guten Bibliotheksvorschlägen
    - 3.1.3 Nicht identifizierte Substanzen
  
  - 3.2 Stoffdatensammlung ausgewählter Stoffe aus dem GC/MS-Screening**

## **1 EINFÜHRUNG**

In den Tätigkeitsberichten 2002 und 2003 war das Kapitel zum GC/MS-Screening nur kurz abgehandelt worden. Grund dafür war, dass die Notwendigkeit erkannt wurde, die Daten systematischer auszuwerten, um die Möglichkeiten und Grenzen des Einsatzes dieser Methode am Standort klarer zu definieren sowie ggf. auch Rückschlüsse auf den Umfang des Routine-Messprogramms zu ziehen.

Der vorliegende Bericht schließt nun die Lücke und diskutiert detailliert die Screening-Befunde der Jahre 2002 und 2003.

## **2 METHODE**

### **2.1 GC/MS-Screening an den Messwasserleitungen 1 und 4**

In den Jahren 2002 und 2003 wurden die Proben der Messwasserleitung 1 und der Messwasserleitung 4, wie im Tätigkeitsbericht 1998 ausführlich beschrieben, täglich angereichert und gescreent.

Im Jahr 2003 wurde das GC/MS-Screening kurzzeitig wegen Personalengpässen (Mutterschutz) von Februar bis Ende Mai an der Messwasserleitung 1 auf ein Beprobungszeitraster von 72 bzw. 96 Stunden und an der Messwasserleitung 4 auf eine wöchentliche Probenahme reduziert. Ab Juni 2003 wurde wieder regelmäßig die Messwasserleitung 1 im normalen 24-Stunden-Rhythmus und die Messwasserleitung 4 im normalen 72- bzw. 96-Stunden-Rhythmus beprobt, sowie auch schon zuvor im Jahr 2002.

Von der Probennahme bis zum Ergebnis gab es in beiden Jahren keinerlei Probleme mit der eingearbeiteten Methodik. Bei der Auswertung der auffälligen Peaks wurden die Peakflächen wie schon in den Vorjahren über den Totalionenstrom integriert. Nur bei der Überlagerung von Peaks wurden die Peakflächen über die Summe von drei verschiedenen Massen bestimmt.

## **2.2 Kurzbeschreibung der Methoden**

### **2.2.1 Aktuelle Screening-Methode an der Messwasserleitung 1**

<b>Messstelle:</b>	Rhein bei Worms, Fluss-km 443,3 Messwasserleitung 1, linksrheinisch, erfasst Abwasserfahne der BASF-Kläranlage
<b>Filtration:</b>	Gelman Minicapsule 0,45 µm, Technik nach CORFÚ, RÜS Weil am Rhein
<b>Beprobung:</b>	24 Stunden, kontinuierlich von 06:00 Uhr bis 06:00 Uhr (in 2003: Ausnahme von Februar bis Ende Mai: 72 bzw. 96 Stunden kontinuierlich von 06:00 Uhr bis 06:00 Uhr) mit Zeitschaltuhr PT 810 S und Motorventil TMV 6 (Fa. Latek), Probenvolumen: ca. 6 - 8 Liter
<b>Festphase:</b>	XAD-Harz Supelpak 2B, Fa. Supelco; Reinigung mit Ethylacetat; Konditionierung mit Methanol
<b>Probenaufbereitung:</b>	1. Trocknung der Festphase; 2. Elution mit Ethylacetat 3. Zugabe von 1 µg des Internen Standards je Liter Probe (Gemisch von sieben n-Chloralkanen); 4. Einengen im Stickstoffstrom auf 1 ml mit Optocontrol FN 4204500, Fa. Barkey
<b>Messgerät:</b>	CTC-A200 SE Autosampler; Gaschromatograph mit GCQ-Massenspektrometer Fa. Axel Semrau bzw. Finnigan
<b>Trennsäule:</b>	HT 5; Länge 25 m; ID 0,22 mm; Filmdicke 0,1 µm
<b>GC/MS-Bedingungen:</b>	vgl. Tätigkeitsbericht 1997
<b>Auswertung:</b>	Ausgewertet wurden die Peaks, die höher als die Peaks des ent- sprechenden Internen Standards waren. Die Konzentrationen wurden nur über den Internen Standard abgeschätzt. Wiederfin- dungsraten und Responsefaktoren wurden vernachlässigt.

### **2.2.2 Aktuelle Screening-Methode an der Messwasserleitung 4**

<b>Messstelle:</b>	Rhein bei Worms, Fluss-km 443,3 Messwasserleitung 4, rechtsrheinisch erfasst die Neckarfahne
<b>Filtration:</b>	Gelman Minicapsule 0,45 µm Technik nach CORFÚ, RÜS Weil am Rhein
<b>Beprobung:</b>	ca. 72 bzw. 96 Stunden, (in 2003: Ausnahme von Februar bis Ende Mai wöchentlich) ohne automatische Zeiteumschaltung Probenvolumen: ca. 15 - 20 Liter
<b>Festphase:</b>	XAD-Harz Supelpak 2B, Fa. Supelco; Reinigung mit Ethylacetat Konditionierung mit Methanol



<b>Probenaufbereitung:</b>	1. Trocknung der Festphase; 2. Elution mit Ethylacetat 3. Zugabe von 1 µg des Internen Standards je Liter Probe (Gemisch von sieben n-Chloralkanen); 4. Einengen im Stickstoffstrom auf 1 ml mit Optocontrol FN 4204500, Fa. Barkey
<b>Messgerät:</b>	CTC-A200 SE Autosampler; Gaschromatograph mit GCQ-Massenspektrometer Fa. Axel Semrau bzw. Finnigan
<b>Trennsäule:</b>	HT 5; Länge 25 m; ID 0,22 mm; Filmdicke 0,1 µm
<b>GC/MS-Bedingungen:</b>	vgl. Tätigkeitsbericht 1997
<b>Auswertung:</b>	Ausgewertet wurden die Peaks, die höher als die Peaks des entsprechenden Internen Standards waren. Die Konzentrationen wurden nur über den Internen Standard abgeschätzt. Wiederfindungsraten und Responsefaktoren wurden vernachlässigt.

### 3 ERGEBNISSE

#### 3.1 Allgemeine Aussagen

Als Auffälligkeiten wurden Stoffe gewertet, die vom „Normalzustand“ der Chromatogramme abwichen. Möglich war dabei, dass die Konzentration eines zuvor schon detektierten Stoffes auffällig anstieg oder dass ein Stoff neu im Chromatogramm gefunden wurde.

Die Tabelle 1 zeigt die Häufigkeit der registrierten Auffälligkeiten.

Tab.1: Häufigkeit der registrierten Auffälligkeiten

	2002	2003
Registrierte Auffälligkeiten an Messwasserleitung 1 (linksrheinisch)	114	86
Davon mit einem abgeschätzten Konzentrationsmaximum über 1 µg/L	4	16
Registrierte Auffälligkeiten an Messwasserleitung 4 (rechtsrheinisch)	49	87
Davon mit einem abgeschätzten Konzentrationsmaximum über 1 µg/L	1	1

Die Jahresübersichten der registrierten Auffälligkeiten und die Darstellungen der Konzentrationsverläufe der auffälligen Substanzen mit einem abgeschätztem Konzentrationsmaximum über 1 µg/L befinden sich in den Anhängen 1 und 2.

Im Jahr 2002 wurden Mitte September Triethylenglycoldichlorid und Anfang Dezember 2,6-Dimethylanilin jeweils aus einem Industrieareal in der Schweiz emittiert. Beide Stoffe wurden in der RÜS Weil am Rhein mit dem GC/MS-Screening detektiert. Entsprechend zeitversetzt wurden beide Stoffe auch noch in Worms im GC/MS-Screening gefunden. Der linksrheinische Befund von Triphenylphosphinsulfid im Juli konnte auf einen erhöhten Eintrag eines nahe gelegenen großen Industriebetriebs zurückgeführt werden.

Im Jahr 2003 ist besonders die Auffälligkeit vom 19.07.2003 hervorzuheben, bei der im GC/MS-Screening auf der Messwasserleitung 1 ca. 20 µg/L der Substanz Hydrodehydrolinoolol detektiert wurden. Der vereinbarte Alarmschwellenwert von 15 µg/L an Messwasserleitung 1 war damit überschritten und es wurde ein Alarm der Stufe „Rote Lampe“ an die übergeordnete Behörde weitergemeldet. Die Substanz konnte sogar noch in den Messstationen Mainz und Bad Honnef detektiert werden. Verursacht wurde die Auffälligkeit durch eine erhöhte Emission des Stoffes im Kläranlagenablauf des o. g. großen Industriebetriebs.

Mitte August 2003 trat ein unbekannter Stoff mit einem abgeschätzten Konzentrationsmaximum von ca. 7 µg/L linksrheinisch auf, der von einem weiteren unbekanntem Stoff mit einem annähernd gleichen Massenspektrum und Konzentrationsverlauf begleitet wurde. In Bad Honnef und Düsseldorf-Flehe konnte zeitversetzt ebenfalls ein unbekannter Stoff mit ähnlichem Massenspektrum detektiert werden, so dass man davon ausgehen kann, dass es sich unter Berücksichtigung der unterschiedlichen Aufnahmebedingungen der Massenspektren um den gleichen Stoff handelt. Leider konnte der Stoff nicht weiter identifiziert werden.

Neben der Auswertung der registrierten Auffälligkeiten und der Konzentrationsverläufe der auffälligen Substanzen über 1 µg/L wurde jeweils für die Messwasserleitung 1 und die Messwasserleitung 4 getrennt eine Stoffliste ermittelt. Diese Stofflisten geben einen Überblick über die im Rhein tatsächlich detektierten Substanzen. Die Stofflisten sind ebenfalls in den

Anhängen 1 und 2 zu finden. In Anhang 3 ist zusätzlich eine Übersicht über das wiederholte Auftreten der im Screening gefundenen Substanzen in den Jahren 1997 bis 2003 enthalten.

Die Tabelle 2 zeigt die Anzahl der detektierten Substanzen.

Tab. 2

	<b>2002</b>	<b>2003</b>
Detektierte Substanzen an Messwasserleitung 1	238	263
Davon identifiziert	42	38
mit gutem Bibliothek-Vorschlag	48	49
nicht identifiziert	148	176
Detektierte Substanzen an Messwasserleitung 4	134	149
Davon identifiziert	27	30
mit gutem Bibliothek-Vorschlag	26	37
nicht identifiziert	81	82

Die Substanzen, die in der Tabelle 2 als „identifiziert“ angegeben sind, wurden mit einem Standard abgesichert. Bei den Substanzen „mit gutem Bibliothek-Vorschlag“ lieferte die NIST 98-Spektrenbibliothek gut übereinstimmende Vorschläge mit hoher Wahrscheinlichkeit zur Identifizierung der Substanzen. Sie wurden allerdings nicht mit einem Standard abgesichert. Für einen Großteil der Substanzen lieferte keine der vorhandenen Spektrenbibliotheken einen gut übereinstimmenden Vorschlag.

## **3.2      Stoffspezifische Aussagen**

Das Spektrum der im Rhein gefundenen Substanzen ist sehr weitreichend: Es sind Industriechemikalien, Weichmacher, Kunststoffadditive, Farbstoffe, Flammschutzmittel, Kühlmittel/Schmierstoffe, Abriebstoffe von Autoreifen, Teerinhaltstoffe, Arzneimittelstoffe, Hormone, Duftstoffe, Parfümadditive, Tenside, optische Aufheller, UV-Absorber, Pflanzenschutzmittel und auch ein Insektenrepellent im Rhein zu finden. In Anhang 3 ist erstmalig für ausgewählte Substanzen, die bisher im GC/MS-Screening gefunden wurden, eine Zusammenstellung von Stoffdaten der Substanzen, ihrer Herkunft (wenn bekannt) und ihrer Verwendung enthalten.

### **3.2.1    Industriechemikalien**

Die linksrheinische Messstelle 1 ist wesentlich stärker durch Industriechemikalien belastet als die Messstelle 4. Die linksrheinischen Industriechemikalien wurden häufig mit deutlich ausgeprägten Peaks detektiert.

Aber auch an der Messstelle 4 wurden die Industriechemikalien Tinuvin P und Triacetonamin detektiert, die als UV-Stabilisator gegen Ausbleichen und Verspröden in der Kunststoff- und Lackindustrie Verwendung finden. Beide Stoffe gehören zu den so genannten H.A.L.S. – Abwässern (Hindered Amine Light Stabilizers) eines in Lampertheim beheimateten Industriebetriebes.

Ansonsten zeigten die Substanzen an Messstelle 4 in beiden Jahren deutlich geringere Peak-Intensitäten als an der Messstelle 1.

### **3.2.2    Pflanzenschutzmittel**

Die Pflanzenschutzmittel wurden hauptsächlich zur Anwendungszeit im Frühjahr und im Herbst gefunden. Ihre Peaks hatten in der Regel nur geringe Intensitäten.

In beiden Jahren wurden an der Messstelle 1 zu den Anwendungszeiten die Herbizide Achetochlor, Alachlor, Atrazin, Ethofumesat, Metazachlor, Metolachlor, Swep, das Fungizid Vinclozolin und gelegentlich das Ausgangsprodukt für die Bentazonherstellung AIPA (Anthranilsäureisopropylamid) gefunden werden.

Im Jahr 2002 wurden an Messstelle 1 noch zusätzlich das Herbizid Propyzamid und das Insektizid Carbofuran detektiert.

Im Jahr 2003 wurden an der Messstelle 1 noch zusätzlich das Fungizid Metalaxyl und das Insektizid Diazinon gefunden. Erhöhte Spitzenbefunde von AIPA in 2003 stehen mit Emissionen aus dem Kläranlagenablauf der BASF in Zusammenhang.

Begleitend zu einem Alarm im Dynamischen Daphnientest und einer erhöhten Schwebstofffracht nach einem heftigen Regenfall wurde Anfang Juni 2003 im GC/MS-Screening der Messwasserleitung 1 das Herbizid Ethofumesat mit einer auffälligen Konzentrationserhöhung jedoch unter 1 µg/L detektiert. Nachforschungen ergaben, dass der kurz oberhalb der Rheingütestation linksrheinisch einmündete Nebenbach Eckbach eine enorme Menge Trübstoff in den Rhein einbrachte (vgl. ausführliche Darstellung im Tätigkeitsbericht 2003, Teil 1). Die Ursache hierfür war eine Überlastung des Kläranlagenablaufes am Oberlauf bei Grünstadt. In Stichproben aus dem Eckbach und dem benachbarten Altbach, die offline mit der GC/MS-Screeningmethode angereichert wurden, wurde Ethofumesat in abgeschätzten Konzentrationen bis zu 4 µg/L gefunden.

An der rechtsrheinischen Messstelle 4 wurden in beiden Jahren zur Anwendungszeit die beiden Herbizide Alachlor und Atrazin, gefunden.

Im Jahr 2002 wurde rechtsrheinisch zusätzlich auch noch das Herbizid Metolachlor und AIPA detektiert und im Jahr 2003 zusätzlich die Herbizide Acetochlor, Ethofumesat und Terbutylazin, das Fungizid Chloroneb und das Insektizid Diazinon.

Das Repellent DEET (N,N-Diethyl-m-toluamid), der Wirkstoff von „Autan“, wird meist regelmäßig im Sommer an beiden Messstellen gefunden.

### 3.2.3 Arzneimittelwirkstoffe

Bei den Arzneimittelwirkstoffen sind das Antiepileptikum Carbamazepin und sein Abbauprodukt Iminostilben regelmäßig mit ausgeprägten Peaks im Rhein vorzufinden.

Auch der Arzneimittelwirkstoff Diazepam wurde in beiden Jahren gefunden. Es ist ein Tranquilizer und ist unter dem Handelsnamen „Valium“ weitläufig bekannt.

Im Jahr 2002 wurde auch erstmalig ein Derivat des Antiepileptikums Phenobarbital detektiert. An der Messstelle 4 wurde auch noch ein Artefakt von Demoxepam gefunden. Demoxepam ist ein Metabolit von Chlordiazepoxid, das als Tranquilizer verwendet wird.

Im Jahr 2003 wurde rechtsrheinisch das Schmerzmittel Propyphenazon detektiert, das bei Kopfschmerzen, Zahnschmerzen aber auch bei Arthrose angewendet wird.

In beiden Jahren wurde rechtsrheinisch auch das Rheumamittel Prednisolon gefunden.

Auffällig war im Jahr 2003 eine deutliche Zunahme von Stoffen mit hormoneller Wirkung im Vergleich zum Jahr 2002. Dazu gehören unter anderem das weibliche Geschlechtshormon Equilin und ein Abkömmling des Androsteron.

#### 3.2.4 Duftstoffe

Zu den Duftstoffen, die regelmäßig im Rhein mit ausgeprägten Peaks gefunden werden und vermutlich über die Kläranlagenabläufe eingetragen werden, gehören Galaxolid (HHCB) und Tonalid (AHTN). Celestolid (ADBI) wird seltener gefunden. Auch Caren (guter Bibliotheksvorschlag), das in der Parfümindustrie als Ozonisierungsprodukt Verwendung findet, wird regelmäßig gefunden.

#### 3.2.5 Flammschutzmittel

Die Flammschutzmittel Tris-(2-chlorethyl)-phosphat (TCEP) und das Tris-(2-chlorpropyl)-phosphat (TCPP), die hauptsächlich in Polyurethanschäumen Anwendung finden, werden regelmäßig zum Teil mit ausgeprägten Peaks gefunden. Vermutlich werden sie aus den Kläranlagen und durch Bau- und Abrisstätigkeiten in den Rhein eingetragen. Die halogenierten Organophosphate sind in den Kläranlagen kaum abbaubar. Wiederholt wurde in beiden Jahren auch das Flammschutzmittel Triphenylphosphat mit deutlichem Peak detektiert.

### 3.2.6 Weichmacher

Während die regelmäßig detektierten Dibutylphthalat und Di-(2-ethylhexyl)phthalat höchstwahrscheinlich Kontaminationen der Proben sind, konnten hingegen bei den detektierten Weichmachern Dimethylphthalat und Diethylphthalat die Auffälligkeiten schon mehrfach in Bezug zu Emissionen aus dem Ablauf einer nahe gelegenen Industrie-Kläranlage gebracht werden. Ungeklärt ist die bislang die Herkunft des wiederholt sporadisch auftretenden Weichmachers Dipropyladipinsäureester, der beidseitig im Rhein in hohen Konzentrationen größer 1 µg/L vorkommt. Die Substanz kommt nach Aussage der BASF nicht aus ihrem Kläranlagenablauf. Eine Nachfrage an das hessische Landesamt blieb bislang unbeantwortet. Ob es sich bei dem Stoff ebenfalls um eine Kontamination handelt, konnte nicht eindeutig geklärt werden.

### 3.2.7 Kunststoffadditive

In beiden Jahren wurde im Rhein Triallyl-isocyanurat (TAIC) gefunden, das als Vernetzer für die Herstellung Kunststoffen, wie z. B. Kabelummantelungen, Verwendung findet. Die Substanz wurde ebenfalls im Sommer 2004 vom Amt für Umwelt und Energie in Basel in Trinkwasserbrunnen nahe dem Fluss Wiese festgestellt. Der Stoff wurde von einem Industriebetrieb auf deutscher Seite am Oberlauf der Wiese mit dem belasteten Abwasser eingeleitet.

Regelmäßig wurde im Rhein in beiden Jahren das Hexa(methoxymethyl)melamin (HMMM) mit sehr hohen Peaks gefunden. Bei der Substanz handelt es sich um Melaminharz, das als Vernetzer für Beschichtungen und in Einbrennlacken eingesetzt wird. Melaminharze finden vielfach Anwendung bei Laminaten, Elektroisolierteilen, Küchengeräten, Geschirr, zur Beschichtung von Holzwerkstoffen und zur Verleimung von Spanplatten.

### **3.3 Vergleich des GC/MS-Screenings mit dem routinemäßigen Messprogramm auf organische Mikroverunreinigungen**

Von den 27 Substanzen, die im Jahr 2003 mit dem routinemäßigen Messprogramm auf organische Mikroverunreinigungen festgestellt wurden, können 18 Stoffe ebenfalls mit der GC/MS-Screening-Methode bei hohen Konzentrationen detektiert werden. Neun der im Routinemessprogramm 2003 detektierten Stoffe können aufgrund der aufwendigeren Analysemethoden nicht mit der GC/MS-Screeningmethode gefunden werden.

Von den insgesamt 125 im routinemäßigen Messprogramm auf organischen Mikroverunreinigungen untersuchten Substanzen können 70 Stoffe theoretisch mit großer Wahrscheinlichkeit bei entsprechender Konzentration als Auffälligkeit im GC/MS-Screening detektiert werden.

Der Hauptteil der Stoffe stammt aus der Gruppe der schwerflüchtigen Einzelstoffe (alle außer Hexachlorbutadien und 2-Chlorpyridin). Mit der GC/MS-Screeningmethode kann keine Substanz aus der Gruppe der Komplexbildner, Phenylharnstoffe und Phenoxyalkancarbonsäuren bestimmt werden. Bei der Gruppe der Triazine können mit relativ schlechter Wiederfindungsrate Atrazin, Simazin, Terbutylazin und Terbutryn mit der GC/MS-Screeningmethode gefunden werden. Bei der Gruppe der weiteren Herbizide können 10 Substanzen mit hoher Wahrscheinlichkeit detektiert werden, sieben der Substanzen müssten getestet werden. Bentazon und Metamitron aus dieser Gruppe können nicht mit dem GC/MS-Screening erfasst werden. Aus der Gruppe der Fungizide können Metalaxyl und Vinclozolin mit dem GC/MS-Screening erfasst werden, die restlichen dieser Gruppe müssten auch wieder getestet werden. Bei der Gruppe der Insektizide kann Dimethoat mit dem GC/MS-Screening erfasst werden, Etrimfos, Propetamfos und Propoxur müssten getestet werden, alle anderen aus dieser Gruppe können im Screening erfasst werden. Für TPPO und Clofibrinsäure ist die Screening-Methode nicht geeignet. TCEP und TCPP und Carbamazepin werden regelmäßig im GC/MS-Screening detektiert.

Die GC/MS-Screening-Methode ist darauf ausgerichtet, Auffälligkeiten eines möglichst breiten Spektrums an Stoffen mit nicht allzu großem Aufwand zu erfassen. Dabei wird auf eine Optimierung des Verfahrens zur Erlangung der niedrigsten Bestimmungsgrenze eines einzelnen Stoffes verzichtet. Aus diesem Grund liegen die Bestimmungsgrenzen beim Screening wesentlich höher als bei der Routineanalytik. Die ermittelten Konzentrationsangaben sind nur abgeschätzt, um die Zeitnähe zum Auftreten der Auffälligkeit zu gewährleisten. Auf Wiederfindungsraten und aufwendige Kalibrierverfahren wird ebenfalls verzichtet.



Die tägliche GC/MS-Screening-Methode ist dennoch in der Lage, Auffälligkeiten der oben erwähnten Substanzen bei entsprechenden Konzentrationen zu detektieren.

Von den insgesamt ca. 530 im GC/MS-Screening (seit 1997) detektierten Stoffen werden nur ca. 13 % im Routine-Untersuchungsprogramm auf organische Mikroverunreinigungen untersucht. Durch das GC/MS-Screening erhält man neben dem Auffinden von Auffälligkeiten wertvolle Informationen über die Stoffpalette der tatsächlich im Rhein vorkommenden Stoffe. Die Zusammensetzung dieser Stoffpalette ist ständigen Veränderungen unterworfen. Neue Stoffe treten auf, andere Stoffe sind im Folgejahr nicht mehr zu finden. Das GC/MS-Screening gibt Hinweise darauf, welche Stoffe noch zusätzlich genauer untersucht werden sollten, weil sie rheinrelevant sind und noch nicht im Routinemessprogramm enthalten sind.

Von den in den Jahren 2002 und 2003 im GC/MS-Screening detektierten *Pflanzenschutzmitteln* wurden 10 auch im Routinemessprogramm untersucht. Die beiden Pestizide Acetochlor und Swep wurden zur Anwendungszeit regelmäßig mit gut ausgeprägten Peaks im Screening gefunden, sie waren aber nicht im Routinemessprogramm enthalten. Bei zwei weiteren im Routinemessprogramm fehlenden Pestiziden (Propyzamid und Chloroneb) handelt es sich um Einzelbefunde im GC/MS-Screening.

Die meisten Lücken weist das Routinemessprogramm bei der Gruppe der doch relativ *speziellen Industriechemikalien* auf. Die Industriechemikalien sind sehr vom Standort Worms geprägt und an anderen Messstellen nur bedingt auffindbar. Jedoch traten diese Industriechemikalien sehr häufig in relativen hohen Konzentrationen im Screening auf. Dazu gehören z. B. an der Messstelle 1 die Lactone, Triphenylphosphinsulfid, 1,8-Naphththalimid, N-(2,6-Dimethylphenyl)-N-(methyl-1-pyrazol)-1-pyrazolessigsäureamid, Diphenylphosphinsäureethylester, 2,3,3-Trimethyl-3H-indol, 2-Methylen-1,3,3-trimethylindolin, Formylmethylentriphenylphosphoran (nur Bibliotheksvorschlag, wahrscheinlich ein Abkömmling von TPPO), N-Methylphtalimid und noch ca. 10 - 20 Substanzen, die leider bisher noch nicht klar identifiziert werden konnten. An der Messstelle 4 traten nur Triacetonamin und noch drei weitere noch nicht identifizierte Industriechemikalien häufig in höheren Konzentrationen im Screening auf. Für die genannten Industriechemikalien wäre es besonders interessant, die wirklichen Konzentrationen in einem Routinemessprogramm ähnlich der Industriechemikalie TPPO zu ermitteln.

Regelmäßig und mit hohen Konzentrationen traten Hexa(methoxymethyl)melamin und Triallyl-isocyanurat und das Tensid Surfynol im GC/MS-Screening auf. Alle drei Substanzen sind standortunabhängig regelmäßig im Rhein zu finden und fehlen ebenfalls in der Stoffliste des Routinemessprogramms.

Bei den *Arzneimitteln* wurden nur der Lipidsenker Clofibrinsäure und das Carbamazepin im Routinemessprogramm analysiert. Hier würden noch das Diazepam (Valium) und das Iminostilben (Abbauprodukt des Carbamazepin) wegen ihres regelmäßigen Auftretens das Routinemessprogramm aus den Screeningbefunden sinnvoll ergänzen. Bei den anderen oben genannten Arzneimittelstoffen handelt es sich um Einzelbefunde im Screening.

Die regelmäßig im Rhein vorkommenden Flammenschutzmittel werden schon in der Routineanalytik erfasst. Bei den Duftstoffen aus dem Screening ist noch Galaxolid wegen seines fast täglichen Vorkommens für die Routineanalytik zu ergänzen.

Fazit:

Das GC/MS-Screening erweist seinen Nutzen nicht nur für die zeitnahe Intensivüberwachung der Rheinwasserqualität („Alarm-Überwachung“), sondern ergänzt die Routineanalytik auf organische Mikroverunreinigungen, indem es – adäquate Auswertung vorausgesetzt – Hinweise auf das Vorkommen weiterer wichtiger Stoffe und Stoffklassen gibt. Andererseits kann es methodenbedingt eine normgerechte Analyse nicht ersetzen.

# ANHÄNGE



## **Anhang 1.1**

**Messwasserleitung 1**

**2002**



## Übersicht über die 2002 in der Messwasserleitung 1 detektierten Auffälligkeiten:

Monat	Probendatum von 6:00 Uhr bis 6:00 Uhr des darauf folgenden Tages	Detektierte Substanz	Über den internen Standard abgeschätztes Konzentrationsmaximum in µg/L (Probe)
<b>Januar</b>	10. – 21.1.2002	Carbamazepin	0,2
	14. – 31.1.2002	Formylmethylen-triphenylphosphoran	0,5
	14. – 31.1.2002	Lactonderivat	0,1
	14. – 28.1.2002	Isophoronitril	0,2
	17. – 21.1.2002	Nicht identifizierbare Substanz mit den charakteristischen Massen 113,171,131,57,87,41	0,1
	17. – 31.1.2002	N-(2,6-Dimethylphenyl)-N-(methyl- 1-pyrazol)-1-pyrazolessigsäureamid	0,1
	21. – 31.1.2002	Nicht identifizierbare Substanz mit den charakteristischen Massen 128,184,157,213	0,1
	30. – 31.1.2002	Anthranilsäureisopropylamid	<0,1
<b>Februar</b>	1. – 4.2.2002	Isophoronitril	0,1
	1. – 4.2.2002	N-(2,6-Dimethylphenyl)-N-(methyl- 1-pyrazol)-1-pyrazolessigsäureamid	0,1
	1. – 16.2.2002	Anthranilsäureisopropylamid	0,1
	1. – 28.2.2002	Lactonderivat	0,2
	1. – 28.2.2002	Carbamazepin	0,1
	1. – 28.2.2002	Formylmethylen-triphenylphosphoran	0,5
	6. – 8.2.2002	Nicht identifizierbare Substanz mit den charakteristischen Massen 140,83,196,69,167,109	0,3
	10. – 16.2.2002	Nicht identifizierbare Substanz mit den charakteristischen Massen 129,156,115,77	0,1
	13. – 14.2.2002	Nicht identifizierbare Substanz mit den charakteristischen Massen 213,124,185	0,1

Monat	Probendatum von 6:00 Uhr bis 6:00 Uhr des darauf folgenden Tages	Detektierte Substanz	Über den internen Standard abgeschätztes Konzentrationsmaximum in µg/L (Probe)
	17. – 20.2.2002	Nicht identifizierbare Substanz mit den charakteristischen Massen 83,67,43,55	0,1
<b>März</b>	2. – 16.3.2002	Anthranilsäureisopropylamid	0,1
	2. – 24.3.2002	Carbamazepin	0,1
	2. – 24.3.2002	Triphenylphosphinsulfid	0,1
	2. – 31.3.2002	Lactonderivat	0,1
	2. – 31.3.2002	Formylmethylen-triphenylphosphoran	1,7
	7. – 20.3.2002	Nicht identifizierbare Substanz mit den charakteristischen Massen 129,156,115,77	0,1
	9. – 19.3.2002	N-(2,6-Dimethylphenyl)-N-(methyl- 1-pyrazol)-1-pyrazolesigsäureamid	0,1
	16. – 18.3.2002	Isophoronitril	0,2
	16. – 18.3.2002	2,3,3-Trimethylindolenin	0,2
	17. – 20.3.2002	Nicht identifizierbare Substanz mit den charakteristischen Massen 150,132,374,262	0,7
	18. – 19.3.2002	Nicht identifizierbare Substanz mit den charakteristischen Massen 213,185,157	0,1
	22. – 24.3.2002	Iminostilben	0,1
	23. – 24.3.2002	Phenobarbital-Metabolit	<0,1
28. – 31.3.2002	Di-iso-propyladipinsäureester	0,1	
<b>April</b>	1. – 4.4.2002	Isophoronitril	0,2
	1. – 20.4.2002	Lactonderivat	0,2
	1. – 24.4.2002	Nicht identifizierbare Substanz mit den charakteristischen Massen 81,211,121,229	0,1
	1. – 30.4.2002	Formylmethylen-triphenylphosphoran	0,8



Monat	Probendatum von 6:00 Uhr bis 6:00 Uhr des darauf folgenden Tages	Detektierte Substanz	Über den internen Standard abgeschätztes Konzentrationsmaximum in µg/L (Probe)
	1. – 30.4.2002	N-(2,6-Dimethylphenyl)-N-(methyl-1-pyrazol)-1-pyrazolessigsäureamid	0,2
	2. – 4.4.2002	Nicht identifizierbare Substanz mit den charakteristischen Massen 150,132	0,2
	6. – 8.4.2002	Di-iso-propyladipinsäureester	0,1
	8. – 30.4.2002	Nicht identifizierbare Substanz mit den charakteristischen Massen 129,156,115,77	0,1
	12. – 14.4.2002	Isophoronitril	0,2
	16.4.2002	Di-iso-propyladipinsäureester	<b>1,3</b>
	13. – 16.4.2002	Nicht identifizierbare Substanz mit den charakteristischen Massen 150,132	0,2
	16. – 18.4.2002	Dimethylthiophen	0,1
	17. – 20.4.2002	Nicht identifizierbare Substanz mit den charakteristischen Massen 176,162,219,204,160,134,106,91,186	0,1
	17. – 28.4.2002	Triphenylphosphinsulfid	0,1
	25. – 30.4.2002	Nicht identifizierbare Substanz mit den charakteristischen Massen 150,132	0,3
<b>Mai</b>	1. – 4.5.2002	Nicht identifizierbare Substanz mit den charakteristischen Massen 129,156,115,77	0,1
	1. – 4.5.2002	N-(2,6-Dimethylphenyl)-N-(methyl-1-pyrazol)-1-pyrazolessigsäureamid	0,1
	1. – 31.5.2002	Lactonderivat	0,1
	1. – 31.5.2002	Formylmethylen-triphenylphosphoran	0,9
	1. – 31.5.2002	Triphenylphosphinsulfid	0,1
	6. – 30.5.2002	Metolachlor	<0,1

Monat	Probendatum von 6:00 Uhr bis 6:00 Uhr des darauf folgenden Tages	Detektierte Substanz	Über den internen Standard abgeschätztes Konzentrationsmaximum in µg/L (Probe)
	7. – 17.5.2002	Alachlor	0,1
	7. – 31.5.2002	Atrazin	0,1
	10. – 31.5.2002	N-(2,6-Dimethylphenyl)-N-(methyl-1-pyrazol)-1-pyrazolessigsäureamid	0,2
	10. – 31.5.2002	Nicht identifizierbare Substanz mit den charakteristischen Massen 129,156,115,77	0,1
	12. – 28.5.2002	Ethofumesate	<0,1
	14.5.2002	Di-iso-propyladipinsäureester	<b>3,8</b>
	18. – 23.5.2002	Nicht identifizierbare Substanz mit den charakteristischen Massen 83,67,98,42	0,1
	24. – 27.5.2002	Nicht identifizierbare Substanz mit den charakteristischen Massen 160,175,132,117	0,1
<b>Juni</b>	1. – 8.6.2002	Lactonderivat	0,2
	1. – 8.6.2002	N-(2,6-Dimethylphenyl)-N-(methyl-1-pyrazol)-1-pyrazolessigsäureamid	0,3
	1. – 11.6.2002	Atrazin	< 0,1
	1. – 20.6.2002	Nicht identifizierbare Substanz mit den charakteristischen Massen 81,211,121,229	0,1
	1. – 20.6.2002	Formylmethylen-triphenylphosphoran	0,4
	5. – 8.6.2002	Metolachlor	<0,1
	7. – 9.6.2002	Di-iso-propyladipinsäureester	<b>2,0</b>
	21. – 23.6.2002	Di-iso-propyladipinsäureester	0,3
	26.6.2002	Di-iso-propyladipinsäureester	1,0
	28. – 30.6.2002	N-(2,6-Dimethylphenyl)-N-(methyl-1-pyrazol)-1-pyrazolessigsäureamid	0,2

<b>Monat</b>	<b>Probendatum</b> von 6:00 Uhr bis 6:00 Uhr des darauf folgenden Tages	<b>Detektierte Substanz</b>	<b>Über den internen Standard abgeschätztes Konzentrationsmaximum in µg/L (Probe)</b>
<b>Juli</b>	1. - 17.7.2002	Nicht identifizierbare Substanzen mit den charakteristischen Massen 129,156	0,1
	1.– 31.7.2002	N-(2,6-Dimethylphenyl)-N-(methyl- 1-pyrazol)-1-pyrazolessigsäureamid	0,1
	14. – 17.7.2002	Formylmethylenetriphenylphosphoran	0,1
	11. - 18.7.2002	Dichlorbenzol	0,1
	11. - 31.7.2002	Triphenylphosphinsulfid	0,7
	11. - 31.7.2002	Lactonderivat	0,3
	17. - 19.7.2002	Diethylanilin	0,1
	22. - 23.7.2002	Benzophenon	0,3
	29. - 30.7.2002	Isophoronitril	0,1
	31.7.2002	Benzophenon	0,1
<b>August</b>	1. – 7.8.2002	Benzophenon	0,1
	1. – 7.8.2002	Lactonderivat	0,2
	1. – 7.8.2002	N-(2,6-Dimethylphenyl)-N-(methyl- 1-pyrazol)-1-pyrazolessigsäureamid	0,1
	1. – 7.8.2002	Triphenylphosphinsulfid	0,2
	14. – 31.8.2002	Lactonderivat	0,2
	14. – 31.8.2002	Nicht identifizierbare Substanzen mit den charakteristischen Massen 341,359,208,76,236,149	0,1
	18. – 31.8.2002	N-(2,6-Dimethylphenyl)-N-(methyl- 1-pyrazol)-1-pyrazolessigsäureamid	0,1
	24. – 25.8.2002	Dichlorbenzol	0,1
	26. – 28.8.2002	Toluidin	0,1

<b>Monat</b>	<b>Probandatum</b> von 6:00 Uhr bis 6:00 Uhr des darauffolgenden Tages	<b>Detektierte Substanz</b>	<b>Über den internen Standard abgeschätztes Konzentrationsmaximum in µg/L (Probe)</b>
<b>September</b>	1. – 27.9.2002	N-(2,6-Dimethylphenyl)-N-(methyl-1-pyrazol)-1-pyrazolessigsäureamid	0,4
	1. – 30.9.2002	Lactonderivat	0,2
	2. – 10.9.2002	Vinclozolin	<0,1
	5. – 24.9.2002	Nicht identifizierbare Substanzen mit den charakteristischen Massen 81,211,121,229	0,2
	18. – 24.9.2002	Swep	<0,1
	21. – 31.9.2002	Triethylglycoldichlorid	0,1
	23. – 24.9.2002	Diphenylether	0,2
<b>Oktober</b>	1. - 6.10.2002	Lactonderivat	0,2
	5. - 8.10.2002	N-(2,6-Dimethylphenyl)-N-(methyl-1-pyrazol)-1-pyrazolessigsäureamid	0,1
	5. - 8.10.2002	Nicht identifizierbare Substanzen mit den charakteristischen Massen 81,211,121,229	0,1
	10. - 11.10.2002	Toluidin	0,1
	26. - 27.10.2002	Dimethylanilin	0,1
	30. - 31.10.2002	Nicht identifizierbare Substanzen mit den charakteristischen Massen 129,156	0,1
	31.10.2002	Naphthalimid	0,2
<b>November</b>	2. - 3.11.2002	N-(2,6-Dimethylphenyl)-N-(methyl-1-pyrazol)-1-pyrazolessigsäureamid	0,1
	2. - 4.11.2002	Formylmethylen-triphenylphosphoran	0,1
	2. - 12.11.2002	Lactonderivat	0,2
	8. - 9.11.2002	Di-iso-propyladipinsäureester	0,1
	26. - 30.11.2002	Lactonderivat	0,2

<b>Monat</b>	<b>Probendatum</b> von 6:00 Uhr bis 6:00 Uhr des darauffolgenden Tages	<b>Detektierte Substanz</b>	<b>Über den internen Standard abgeschätztes Konzentrationsmaximum in µg/L (Probe)</b>
<b>Dezember</b>	1. – 26.12.2002	Lactonderivat	0,2
	1. – 26.12.2002	N-(2,6-Dimethylphenyl)-N-(methyl- 1-pyrazol)-1-pyrazolessigsäureamid	0,1
	3. – 8.12.2002	Dimethylanilin	0,2
	8. – 31.12.2002	Anthranilsäureisopropylamid	0,1
	13. – 16.12.2002	Formylmethylen-triphenylphosphoran	0,1



## Stoffliste der 2002 an der Messstelle 1 detektierten Substanzen:

## Mit Standards abgesichert identifiziert:

Alachlor  
 Anthranilsäureisopropylamid (AIPA)  
 Atrazin  
 Benzanthron  
 Benzophenon  
 6-tertiaer-Butyl-o-kresol  
 Carbamazepin  
 Dichloraniline  
 1,2-Dichlorbenzol  
 Diethylphthalat  
 2,6-Dimethylanilin  
 3,4-Dimethyl-benzoesauremethylester  
 2?,4?-Dimethylphenol  
 Dimethylphthalat  
 Diphenylether  
 Diphenylphosphinsaeureethylester  
 Di-tertiaer-butylbenzol  
 3?,5?-Di-tertiaer-butylphenol  
 Ethofumesate  
 Galaxolid 1 (HHCB)  
 Galaxolid 2 (HHCB)  
 Isophoronitril  
 Metazachlor  
 2-Methylen-1,3,3-trimethylindolin  
 2-(Methylthio)-benzothiazol  
 Metolachlor  
 1,8-Naphthalimid  
 N-Butylbenzolsulfonamid  
 N-(2-Chloracetyl)-2,6-dimethylanilin  
 N-(2,6-Dimethylphenyl)-N-(methyl-1-pyrazol)-1-pyrazolesigsäureamid  
 N,N-Diethylanilin  
 N,N-Dimethylbenzamid  
 p-Toluidin  
 Surfynol E102  
 Swep  
 Tetrabutylharnstoff  
 Tonalide  
 Trimethylbenzole  
 2,3,3-Trimethyl-3H-indol  
 Triphenylphosphinsulfid  
 Tris-(2-chlorethyl)-phosphat  
 Vinclozolin

## Vorschläge der NIST-Spektrenbibliothek:

Acetochlor  
 4-sec-Butyl-acridon  
 Bis-iso-propyl-1,1'biphenyl  
 Carbamazepinmetabolit  
 Carbofuran  
 1-Chlor-4-(methylsulfonyl)-benzol  
 Dibenzofuran  
 4-(Diethylamino)-benzonnitril  
 Diethylanilin  
 9,10-Dihydro-1-chlor-4-methyl-9,10-anthrachinon  
 3,4-Dihydro-3,5,8-Trimethyl-1(2H)-naphthalinon  
 4,5-Dihydro-5,5,7-trimethyl-6H-[1,2,5]oxadiazol-[3,4-b][1,4]diazepin  
 2,6-Diisopropyl-anilin  
 Di-iso-propyl-4-methoxymethylbenzol  
 1-(2,4-Dimethylphenyl)-1-propanon  
 2,4-Dimethyl-6-tertiaer-butylphenol  
 3,4-Dimethylthiophen  
 Diphenylsulfon  
 Dipropyladipinsaeureester  
 2,6-Di-teriaer-butyl-p-benzochinon  
 6-(1-Ethylpropyl)-1,2,3,4-tetrahydro-naphthalin  
 Formylmethylen-triphenylphosphoran  
 Hexa(methoxymethyl)melamin  
 Indol  
 Kohlenwasserstoffe  
 Lacton (3 verschiedene)  
 Methansulfamid  
 2-(1S-Methyl-2S-ethyl-4-hydroxybutyl)-1,3-dithian  
 2-Methylindolin  
 N-Methylphthalimid  
 3-(2-Methylphenyl)propionsäure  
 Methylphenylsulfon  
 N-Acetyl-4-cyano-phenylethan-amin  
 N-(2,6-Di-iso-propylphenyl)-methylcarbamate  
 N-(1-methylethyl)-N'-phenyl-1,4-benzoldiamin  
 N-[1-(1-naphthalenyl)ethyl]-acetamid  
 4b,5,6,7,8,8a,9,10-Octahydro-4b,8-dimethyl-2-isopropylphenanthren  
 Phenanthren oder Anthacen  
 Phenobarbital MTB1  
 1-Phenyl-2-methyl-6,7-dimethoxy-1,2,3,4-tetrahydroisochinolin  
 Propyzamid  
 Triallyl-1,3,5-triazin-2,4,6-(1H,3H,5H)-trion  
 2,4,6-Trichloranilin  
 2,4,6-Trimethyl-benzoesauremethylester  
 2,4,6-Trimethylbenzonnitril  
 3,3,4-Trimethyl-4-(4-methylphenyl)-cyclopentanon  
 Tris(2-Chlorpropyl)phosphat  
 Vitamin E acetat

**Nicht identifizierte Substanzen:****Die Benennung erfolgte nach ihren charakteristischen Massen.**

100,58,86	191,234,121,95,79,67,234
103,132,176,77,162,102,131,51,148	191,95,81,177,109,149
104,157,130	194,91,71,57,41,239
104,78,172	195,210,165,104,180,137,115
105,161,79,77,119,132,146,91	197,155,212,221,143,91,179,41
106,194,152,222,134,180	197,198,199,200,117,153,91,115
107,109,121,67,91,95,139,79,193,208	203,173,145,118,91,65
107,150,95,79,67,135,194	204,118,91,189,132
111,129,83,101	204,125,127
114,185,157,84,213	204,177
122,109,145,200,230,79,41	205,206,145,119,161
123,155,282,284,278,111,95,77,300,	205,206,207,208,116,77,51,143,171
124,139,199,41,185	207,194,117,241,374,312
128,184,213,157,185	207,91,129,149,167,220,67,79,191
129,111,147	208,178,238,270,148
129,115	211,147,244,127,167
129,128	212,227,185,286
129,156	213,212,185,198,,171,157,144,130,116,102
129,156	219,191,234,173,249,251
129,208	219,218,217,220,216,180
129,262	221,176,250,278,165
131,178,191,205,264,165,103	221,220,222,162,99,286,256
132,117,91,257	225,243,69,115,155,84,297,197,41,312
132,143,150,117,107,115,91,79,169	226,211,286,159,195
132,150,262	226,211,91,195,129
134,201,91	227,226,130,170,197
135,95,150	227,242,143,128
140,83,196,69,167	229,271,91
141,123,81,95,169,147,41,150,135,133,67	236,165,208,147,79
141,169,57,85,170	239,43,299,225
141,95,67,41,125	252,251,254
142,141,115	254,161,256,163,176,178,224
146,128,161	256,41
146,91,77,117,160,50	256,144,129,105
151,135,108,91,77	256,258,159,111,81
151,167,179	256,258,260,221,148,111
153,152,151,150,109,129	257,201,239,272
154,153,152,155,151 2-Ring-System	257,229,259,201
154,205	258,191,119,91,57,109,41
154,230,203	258,273,165
155,84,112,241,281,299,197	262,347,288
159,286,288,257	264,191,131,209,103,165,220
160,175,132,117	268,270,161,163,176,178,224,379,381
161,176,206	270,143,171,185,157,129,101,227,199,213,241,115,87,55,43
161,189,133,71,57,106,120,147,175	273,288,231,258,287,277,246
162,119,146,204,91,63	277,248,204,232,176
165,137,180,205,221,109,91	278,279,263
165,166,167,164,163 2-Ring-System	283,315,223,253,193
167,152	298,300,302,88
168,167,121,93,67,112	312,157,213,171,269,199,255,241,227
173,160,133	320,261,235,277,146
173,175,129	320,383,277,340,225
176,191,148,178,193,150,180 enthält 2 Chlor	322,307,265
176,204,219,162	327,359,297,163
177,192,159,119,134,149,91,67,210	338,282,323,173,360
181,128,154	341,359,208
183,156,129,228,217,81	362,377,225,209
185,186,184,187,199,152,135,91	368,260,369,247,386,474,496,167
187,145,119,91,205,107,161	377,362,209



41,57,113,171  
43,41,71,173,243  
43,82,97  
44,144  
57,85,127,155  
63,65,59,4595,107  
67,124,139,109,79,91,193,165,41  
67,69,97,83,55,57,111,125,41  
67,95  
68,107,141  
68,43,83,107  
69,41,105,107  
73,277  
79,95,109,122,145,182,230  
81,121,95,67,41,149,107,177,203,231  
81,123,141,71,57  
81,211,229,143,121,91  
81,67,124,96,166,222,138,152,194,225  
81,95,67,123,152,109,139,41  
82,97  
83,67,57  
91,119,105,,133,79,146,161,206  
91,155,171,172,184,199  
91,221,143,119,234,157,178,209,79  
91,93,79,67,107,117,134,281  
95,81,67,43,109,79,91,108,107117,134,164  
98,100,112,67,84,126,168  
99,147,159,129,83,85,69,41,113,57  
99,155,113,139  
99,226,286,166,136,196,69



**Konzentrationsverläufe der Auffälligkeiten MWL 1 2002**



## GC/MS-Screening auf organische Spurenstoffe

### Auffällige Substanz:

Formylmethylentriphenylphosphoran

im Rhein bei Worms

Messwasserleitung 1 (linksrheinisch)

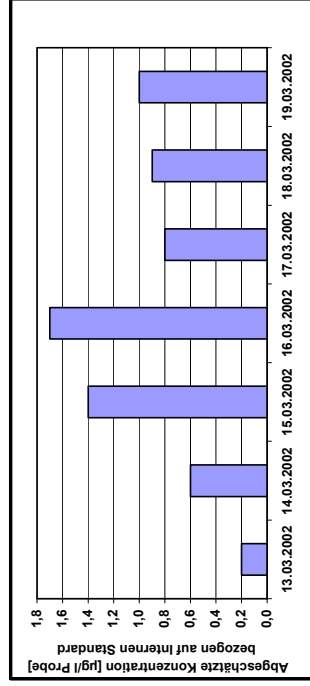
in der 24-h-Mischprobe vom 15.03.2002 6:00 Uhr MEZ  
bis 16.03.2002 6:00 Uhr MEZ

- Die Substanz wurde mit einem Standard abgesichert.  
 Die Substanz wurde nicht mit einem Standard abgesichert.  
 Es handelt sich um einen Vorschlag der NIST-Spektrenbibliothek.  
 Die NIST-Spektrenbibliothek liefert keinen guten Vorschlag.

#### Ergebnisse der letzten Tage (MEZ):

Probe vom	Abschätzung der Konzentration über den Internen Standard [ $\mu\text{g/l}$ ]
13.03.2002 6:00 Uhr - 20.05.2002 6:00 Uhr	0,2
14.03.2002 6:00 Uhr - 21.05.2002 6:00 Uhr	0,6
15.03.2002 6:00 Uhr - 22.05.2002 6:00 Uhr	1,4
16.03.2002 6:00 Uhr - 23.05.2002 6:00 Uhr	1,7
17.03.2002 6:00 Uhr - 24.05.2002 6:00 Uhr	0,8
18.03.2002 6:00 Uhr - 25.05.2002 6:00 Uhr	0,9
19.03.2002 6:00 Uhr - 26.05.2002 6:00 Uhr	1,0

Die Substanzkonzentration wurde nur über den Internen Standard abgeschätzt. Wiederfindungsraten und Responsefaktoren wurden nicht berücksichtigt.



Rheingütestation Worms

## GC/MS-Screening auf organische Spurenstoffe

### Auffällige Substanz:

Di-iso-propyladipinsäureester

im Rhein bei Worms

Messwasserleitung 1 (linksrheinisch)

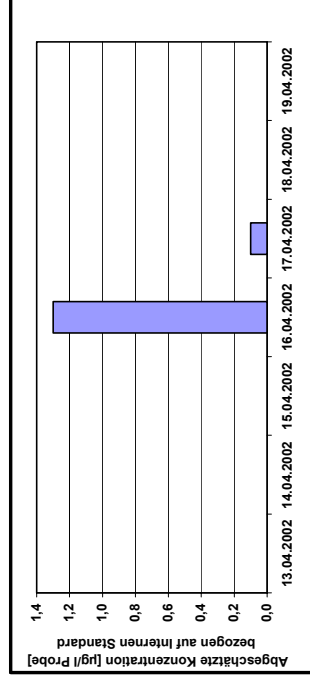
in der 24-h-Mischprobe vom 16.04.2002 6:00 Uhr MEZ  
bis 17.04.2002 6:00 Uhr MEZ

- Die Substanz wurde mit einem Standard abgesichert.  
 Die Substanz wurde nicht mit einem Standard abgesichert.  
 Es handelt sich um einen Vorschlag der NIST-Spektrenbibliothek.  
 Die NIST-Spektrenbibliothek liefert keinen guten Vorschlag.

#### Ergebnisse der letzten Tage (MEZ):

Probe vom	Abschätzung der Konzentration über den Internen Standard [ $\mu\text{g/l}$ ]
13.04.2002 6:00 Uhr - 14.04.2002 6:00 Uhr	0,0
14.04.2002 6:00 Uhr - 15.04.2002 6:00 Uhr	0,0
15.04.2002 6:00 Uhr - 16.04.2002 6:00 Uhr	0,0
16.04.2002 6:00 Uhr - 17.04.2002 6:00 Uhr	1,3
17.04.2002 6:00 Uhr - 18.04.2002 6:00 Uhr	0,1
18.04.2002 6:00 Uhr - 19.04.2002 6:00 Uhr	0,0
19.04.2002 6:00 Uhr - 20.04.2002 6:00 Uhr	0,0

Die Substanzkonzentration wurde nur über den Internen Standard abgeschätzt. Wiederfindungsraten und Responsefaktoren wurden nicht berücksichtigt.



Rheingütestation Worms

## GC/MS-Screening auf organische Spurenstoffe

### Auffällige Substanz: Di-iso-propyladipinsäure

im Rhein bei Worms

Messwasserleitung 1 (linksrheinisch)

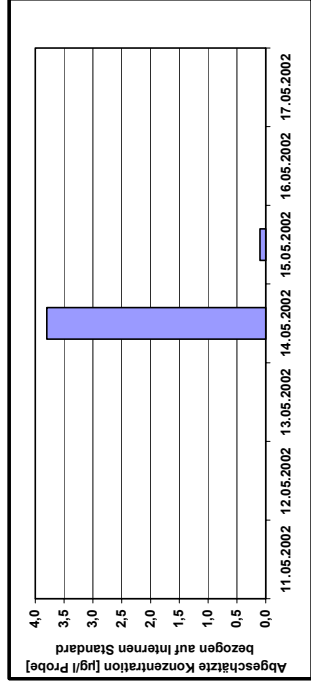
in der 24-h-Mischprobe vom 14.05.2002 6:00 Uhr MEZ  
bis 15.05.2002 6:00 Uhr MEZ

- Die Substanz wurde mit einem Standard abgesichert.  
 Die Substanz wurde nicht mit einem Standard abgesichert.  
 Es handelt sich um einen Vorschlag der NIST-Spektrenbibliothek.  
 Die NIST-Spektrenbibliothek liefert keinen guten Vorschlag.

#### Ergebnisse der letzten Tage (MEZ):

Probe vom	Abschätzung der Konzentration über den Internen Standard [ $\mu\text{g/l}$ ]
11.05.2002 6:00 Uhr - 12.05.2002 6:00 Uhr	0,0
12.05.2002 6:00 Uhr - 13.05.2002 6:00 Uhr	0,0
13.05.2002 6:00 Uhr - 14.05.2002 6:00 Uhr	0,0
14.05.2002 6:00 Uhr - 15.05.2002 6:00 Uhr	3,8
15.05.2002 6:00 Uhr - 16.05.2002 6:00 Uhr	0,1
16.05.2002 6:00 Uhr - 17.05.2002 6:00 Uhr	0,0
17.05.2002 6:00 Uhr - 18.05.2002 6:00 Uhr	0,0

Die Substanzkonzentration wurde nur über den Internen Standard abgeschätzt. Wiederfindungsraten und Responsefaktoren wurden nicht berücksichtigt.



Rheingütestation Worms

## GC/MS-Screening auf organische Spurenstoffe

### Auffällige Substanz: Di-iso-propyladipinsäure

im Rhein bei Worms

Messwasserleitung 1 (linksrheinisch)

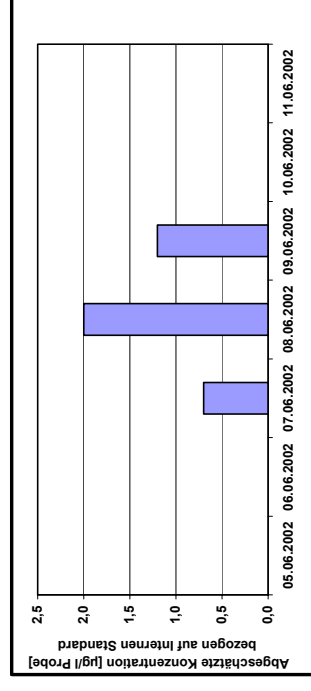
in der 24-h-Mischprobe vom 08.06.2002 6:00 Uhr MEZ  
bis 09.06.2002 6:00 Uhr MEZ

- Die Substanz wurde mit einem Standard abgesichert.  
 Die Substanz wurde nicht mit einem Standard abgesichert.  
 Es handelt sich um einen Vorschlag der NIST-Spektrenbibliothek.  
 Die NIST-Spektrenbibliothek liefert keinen guten Vorschlag.

#### Ergebnisse der letzten Tage (MEZ):

Probe vom	Abschätzung der Konzentration über den Internen Standard [ $\mu\text{g/l}$ ]
05.06.2002 6:00 Uhr - 06.06.2002 6:00 Uhr	0,0
06.06.2002 6:00 Uhr - 07.06.2002 6:00 Uhr	0,0
07.06.2002 6:00 Uhr - 08.06.2002 6:00 Uhr	0,7
08.06.2002 6:00 Uhr - 09.06.2002 6:00 Uhr	2,0
09.06.2002 6:00 Uhr - 10.06.2002 6:00 Uhr	1,2
10.06.2002 6:00 Uhr - 11.06.2002 6:00 Uhr	0,0
11.06.2002 6:00 Uhr - 12.06.2002 6:00 Uhr	0,0

Die Substanzkonzentration wurde nur über den Internen Standard abgeschätzt. Wiederfindungsraten und Responsefaktoren wurden nicht berücksichtigt.



Rheingütestation Worms

## **Anhang 1.2**

**Messwasserleitung 4**

**2002**





## Übersicht über die 2002 in der Messwasserleitung 4 detektierten

### Auffälligkeiten:

Monat	Probendatum	Detektierte Substanz	Über den internen Standard abgeschätztes Konzentrationsmaximum in µg/l (Probe)
<b>Januar</b>	11. – 18.1.2002	2,5,5-Trimethyl-1,3-cyclohexandion	0,2
	11. – 22.1.2002	Nicht identifizierbare Substanz mit den charakteristischen Massen 56,72,170,88	0,2
	29. – 31.1.2002	Atrazin	<0,1
<b>Februar</b>		Keine Auffälligkeiten	
<b>März</b>	1. – 22.3.2002	Carbamazepin	0,1
	19. – 22.3.2002	Nicht identifizierbare Substanz mit den charakteristischen Massen 146,128,161	0,3
	25. – 28.3.2002	Andosteren	<0,1
	25. – 28.3.2002	Kohlenwasserstoffe	<0,1
<b>April</b>	2. – 30.4.2002	Carbamazepin	<0,1
	2. – 9.4.2002	Nicht identifizierbare Substanz mit den charakteristischen Massen 146,128,161	<0,1
	9. – 16.4.2002	Surfynol	<0,1
	26. – 30.4.2002	Atrazin	<0,1
	26. – 30.4.2002	Alachlor	<0,1
	26. – 30.4.2002	Ethofumesate	<0,1
	30.4.2002	Di-iso-propyladipinsäureester	0,3
<b>Mai</b>	1. – 3.5.2002	Di-iso-propyladipinsäureester	0,3
	1. – 31.5.2002	Atrazin	<0,1
	1. – 31.5.2002	Metolachlor	<0,1

Monat	Probendatum	Detektierte Substanz	Über den internen Standard abgeschätztes Konzentrationsmaximum in µg/l (Probe)
	1. – 31.5.2002	Ethofumesate	<0,1
	7. – 17.5.2002	Alachlor	<0,1
	14. – 21.5.2002	Di-iso-propyladipinsäureester	<0,1
	17. – 31.5.2002	Triacetonamin	<0,1
	24. – 28.5.2002	Nicht identifizierbare Substanz mit den charakteristischen Massen 112,97,79,126	<0,1
<b>Juni</b>	1. – 30.6.2002	Atrazin	<0,1
	1. – 11.6.2002	Metolachlor	<0,1
	1. – 14.6.2002	Ethofumesate	<0,1
	1. – 14.6.2002	Carbamazepin	<0,1
	1. – 30.6.2002	Nicht identifizierbare Substanz mit den charakteristischen Massen 257,201,239,141	<0,1
	14. – 30.6.2002	Surfynol	<0,1
<b>Juli</b>	2. – 9.7.2002	Atrazin	<0,1
	2. – 30.7.2002	Nicht identifizierbare Substanz mit den charakteristischen Massen 205,961,145	<0,1
	2. – 30.7.2002	Carbamazepin	<0,1
	2. – 30.7.2002	Surfynol	<0,1
	16. – 30.7.2002	Nicht identifizierbare Substanz mit den charakteristischen Massen 111,343,155,91	<0,1
	30.7.2002	Nicht identifizierbare Substanz mit den charakteristischen Massen 113,173,59	<0,1
<b>August</b>	1. – 12.8.2002	Surfynol	<0,1
	2. – 9.8.2002	Atrazin	<0,1

Monat	Probendatum	Detektierte Substanz	Über den internen Standard abgeschätztes Konzentrationsmaximum in µg/l (Probe)
	2. – 12.8.2002	Carbamazepin	<0,1
	2. – 12.8.2002	Nicht identifizierbare Substanz mit den charakteristischen Massen 205,961,145	<0,1
	2. – 12.8.2002	Nicht identifizierbare Substanz mit den charakteristischen Massen 111,343,155,91	<0,1
	6. – 9.8.2002	Nicht identifizierbare Substanz mit den charakteristischen Massen 113,173,59	<0,1
	13. – 14.8.2002	Di-iso-propyladipinsäureester	<b>1,2</b>
<b>September</b>		Keine Auffälligkeiten	
<b>Oktober</b>		Keine Auffälligkeiten	
<b>November</b>		Keine Auffälligkeiten	
<b>Dezember</b>	3. – 10.12.2002	Dimethylanilin	<0,1
	3. – 17.12.2002	Surfynol	<0,1
	10. – 31.12.2002	Triacetonamin	<0,1
	13. – 17.12.2002	3-Nitro-o-xylol	<0,1
	13. – 17.12.2002	Nicht identifizierbare Substanz mit den charakteristischen Massen 113,173,59	<0,1
	20. – 27.12.2002	Nicht identifizierbare Substanz mit den charakteristischen Massen 88,135	<0,1
	30. – 31.12.2002	2,5,5-Trimethyl-1,3-cyclohexandion	<0,1



**Stoffliste der 2002 an der Messstelle 4 detektierten Substanzen****Mit Standards abgesichert identifiziert:**

Alachlor  
Anthranilsäureisopropylamid (AIPA)  
Atrazin  
Benzophenon  
Carbamazepin oder Metabolit  
1-Chlor-4-(methylsulfonyl)-benzol  
DEET (N,N-Diethyltoluamid)  
Dibenzofuran  
Di-tertiär-butylphenol  
Diethylphthalat  
2,6-Dimethylanilin  
3,4-Dimethyl-benzoesäuremethylester  
Di-iso-octylphthalat  
Diphenylether  
Dipropyladipinsäureester  
Galaxolid (HHCB)  
Metolachlor  
2-(Methylthio)-benzothiazol  
N-Butylbenzolsulfonamid  
N-(2,6-Dimethylphenyl)-N-(methyl-1-Pyrazol)-1-Pyrazolesigsäureamid  
3-Nitro-o-xylol  
Surfynol E102  
Tonalide  
Triphenylphosphinsulfid  
Tris-(2-chlorethyl)-phosphat  
Trimethylbenzol  
Tributylphosphat

**Vorschläge der NIST-Spektrenbibliothek:**

2'-(Benzoylcarbonylamino)benzamid  
4-sec-Butyl-acridon  
Carbamazepinmetabolit  
Caren  
Demoxepam-Artefakt  
Diazepam  
p-Ethoxybenzoesäureethylester  
Formylmethylen-triphenylphosphoran  
1,2,3,4,5,6-Hexahydro-1,1,5,5-tetramethyl-7H-  
2,4a-methanonaphthalen-7-on ?  
Hexa(methoxymethyl)melamin  
Kohlenwasserstoffe  
Lacton  
Methylbenzoat  
2-Methoxy-4-methyl-10H-acridin-9-on  
N-Acetyl-4-cyano-phenylethan-amin  
N-Ethyl-p-toluolsulfonamid  
4b,5,6,7,8,8a,9,10-Octahydro-4b,8-dimethyl-2-  
isopropylphenanthren  
Phenanthren oder Anthacen  
Phlorobutyrophenon  
Prednisolon  
Squalen  
Triacetonamin  
Triallyl-1,3,5-triazin-2,4,6-(1H,3H,5H)-trion  
2,5,5-Trimethyl-1,3-cyclohexandion  
Triphenylphosphat  
Tris(2-Chlorpropyl)phosphat

**Nicht identifizierte Substanzen:**

Die Benennung erfolgte nach ihren charakteristischen Massen.

105,161,79,77,119,132,146,91	205,248,121,91,119,105,233,147,161
111,343,91,68,155	207,194,117,241,374,312 + 132,150,262
112,97,67,79	211,147,244,127,167
123,151,95,166,138,109,180,222,109,67	219,191,234,173,249,251
123,155,282,284,278,111,95,77,300	226,211,91,195,129
129,115	227,242,143,128
129,128	229,120,91,147,201,129,161
129,156	229,93,66
129,156	233,174,135,119,180,203,91
129,111,147	239,43,299,225
131,105,145	253,238,182,196,168
131,121,163,205,192,79,109,220	255,270
131,178,191,205,264,165,103	256,255,257,258,229
132,150,262	256,258,260,221,148,111
135,150,175,248,91,121,205	257,201,239,272
135,191,107,121,91,79,150	257,229,259,201
138,83,222,125,107,91	258,191,119,91,57,109,41
142,141,115	264,191,131,209,103,165,220
146,128,161	270,143,171,185,157,129,101,227,199,213,
147,146,111,203,71,100,87,182	241,115,87,55,43
149,91,190,258,243,57,41,105	278,279,263
155,184,121,161	304,302,306,255,,91,147,232 mit 3 Chlor
157,113,57,59,68,85,189,41	312,157,213,171,269,199,255,241,227
160,175,132,117	322,307,265
165,166,167,164,163	338,282,323,173,360
165,137,180,205,221,109,91	341,359,208
168,167,121,93,67,112	368,353,277,118
168,84,42,126	381,383,379,385,321,269,191,99 mit 3 Chlor
170,241,226,135,185	43,41,71,173,243
178,262,136,160,193	43,59,113,173
179,123,138,194	44,144
182,56,69,140	56,72,99,88,170
183,105,77,51	63,65,59,4595,107
187,145,119	81,121,95,67,41,149,107,177,203,231
187,145,119,91,205,107,161	81,211,229,143,121,91
191,206,100,163,57,58,107,135	88,135
191,234,121,95,79,67,234	93,91,77,79,135,107,121
193,250,91	95,81,67,43,109,79,91,108,107117,134,164
195,210,165,104,180,137,115	97,111,69,83,41,139,125,179,201,277
205,206,145,119,161	98,112,114,115,71,58,156,171
205,189,175,243,217,261,239,232,220,256	99,147,159,129,83,85,69,41,113,57

**Konzentrationsverläufe der Auffälligkeiten MWL 4 2002**





## GC/MS-Screening auf organische Spurenstoffe

### Auffällige Substanz:

**Di-iso-propyl-adipinsäureester**

im Rhein bei Worms

Messwasserleitung 4 (rechtsrheinisch)

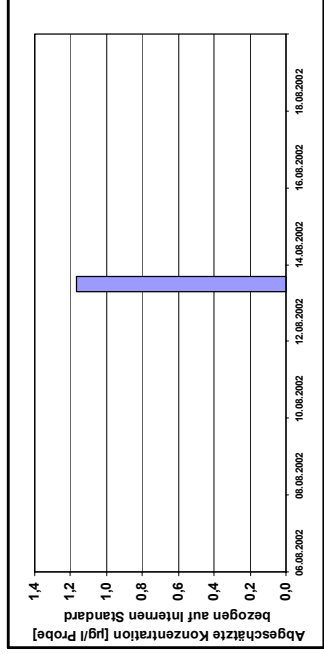
in der 24-h-Mischprobe vom 13.08.2002 8:00 Uhr MESZ  
bis 14.08.2002 8:00 Uhr MESZ

- Die Substanz wurde mit einem Standard abgesichert.
- Die Substanz wurde nicht mit einem Standard abgesichert.
- Es handelt sich um einen Vorschlag der NIST-Spektrenbibliothek.
- Die NIST-Spektrenbibliothek liefert keinen guten Vorschlag.

Ergebnisse der letzten Tage (MEZ):

Probe vom	Abschätzung der Konzentration über den internen Standard [ $\mu\text{g/l}$ ]
06.08.2002 8:00 Uhr - 09.08.2002 8:00 Uhr	0,0
09.08.2002 8:00 Uhr - 12.08.2002 8:00 Uhr	0,0
12.08.2002 8:00 Uhr - 13.08.2002 8:00 Uhr	0,0
13.08.2002 8:00 Uhr - 14.08.2002 8:00 Uhr	1,2
14.08.2002 8:00 Uhr - 15.08.2002 8:00 Uhr	0,0
15.08.2002 8:00 Uhr - 16.08.2002 8:00 Uhr	0,0
16.08.2002 8:00 Uhr - 19.08.2002 8:00 Uhr	0,0
19.08.2002 8:00 Uhr - 20.08.2002 8:00 Uhr	0,0

Die Substanzkonzentration wurde nur über den internen Standard abgeschätzt. Wiederfindungsraten und Responsefaktoren wurden nicht berücksichtigt.



Rheingütestation Worms



## **Anhang 2.1**

**Messwasserleitung 1**

**2003**



## Übersicht über die 2003 in der Messwasserleitung 1 detektierten Auffälligkeiten:

Monat	Probendatum von 6:00 Uhr bis 6:00 Uhr des darauf folgenden Tages	Detektierte Substanz	Über den internen Standard abgeschätztes Konzentrationsmaximum in µg/l (Probe)
<b>Januar</b>	23. – 26.1.2003	Formylmethylen-triphenylphosphoran	1,6
	29. – 31.1.2003	Anthranilsäureisopropylamid	0,2
	29. – 31.1.2003	N-(2,6-Dimethylphenyl)-N-(methyl-1-pyrazol)-1-pyrazolesigsäureamid	0,6
<b>Februar</b>	10. – 27.2.2003	Formylmethylen-triphenylphosphoran	1,5
	14. – 28.2.2003	N-(2,6-Dimethylphenyl)-N-(methyl-1-pyrazol)-1-pyrazolesigsäureamid	0,6
	16. – 27.2.2003	Hexa(methoxymethyl)melamin	0,5
	16. – 27.2.2003	Anthranilsäureisopropylamid	0,2
	16. – 27.2.2003	Nicht identifizierbare Substanz mit den charakteristischen Massen 81,211,143	0,2
	25. – 28.2.2003	Nicht identifizierbare Substanz mit den charakteristischen Massen 111,192,79,67	0,9
	25. – 28.2.2003	Nicht identifizierbare Substanz mit den charakteristischen Massen 167,67,210	0,9
<b>März</b>	12. – 31.3.2003	Formylmethylen-triphenylphosphoran	1,9
	12. – 31.3.2003	Toluidin	0,2
	18. – 27.3.2003	Diphenylphosphinsäureethylester	0,2
	21. – 24.3.2003	Nicht identifizierbare Substanz mit den charakteristischen Massen 167,67,210	0,3
	21. – 24.3.2003	Hexa(methoxymethyl)melamin	1,1
	21. – 24.3.2003	Nicht identifizierbare Substanz mit den charakteristischen Massen 327,359,297	0,7

Monat	Probendatum von 6:00 Uhr bis 6:00 Uhr des darauf folgenden Tages	Detektierte Substanz	Über den internen Standard abgeschätztes Konzentrationsmaximum in µg/l (Probe)
<b>März</b>	21. – 31.3.2003	Nicht identifizierbare Substanz mit den charakteristischen Massen 81,211,143	0,3
	24. – 31.3.2003	N-(2,6-Dimethylphenyl)-N-(methyl- 1-pyrazol)-1-pyrazolessigsäureamid	<b>1,4</b>
<b>April</b>	1. – 8.4.2003	N-(2,6-Dimethylphenyl)-N-(methyl- 1-pyrazol)-1-pyrazolessigsäureamid	0,8
	1. – 5.4.2003	Hexa(methoxymethyl)melamin	0,5
	1. – 5.4.2003	Nicht identifizierbare Substanz mit den charakteristischen Massen 327,359,297,163,223,267	0,3
	5. – 14.4.2003	Nicht identifizierbare Substanz mit den charakteristischen Massen 320,383,277,340	0,2
	11. – 30.4.2003	N-(2,6-Dimethylphenyl)-N-(methyl- 1-pyrazol)-1-pyrazolessigsäureamid	0,5
	14. – 29.4.2003	Diphenylphosphinsäureethylester	0,3
	14. – 30.4.2003	Hexa(methoxymethyl)melamin	0,4
	17. – 26.4.2003	Nicht identifizierbare Substanz mit den charakteristischen Massen 327,359,297,163,223,267	0,2
	23. – 26.4.2003	Toluidin	0,2
	1. – 30.4.2003	Formylmethylen-triphenylphosphoran	<b>3,6</b>
<b>Mai</b>	1. – 23.5.2003	Formylmethylen-triphenylphosphoran	<b>1,0</b>
	1. – 23.5.2003	N-(2,6-Dimethylphenyl)-N-(methyl- 1-pyrazol)-1-pyrazolessigsäureamid	0,4
	25.5.2003	Hexa(methoxymethyl)melamin	0,5
	25.5.2003	Nicht identifizierbare Substanz mit den charakteristischen Massen 327,359,297	0,5

Monat	Probendatum von 6:00 Uhr bis 6:00 Uhr des darauf folgenden Tages	Detektierte Substanz	Über den internen Standard abgeschätztes Konzentrationsmaximum in µg/l (Probe)
Juni	3.6.2003	Ethofumesate	< 0,1
	2. – 23.6.2003	Nicht identifizierbare Substanzen mit den charakteristischen Massen 341,359,208,193,236	0,2
	23.6.2003	Nicht identifizierbare Substanzen mit den charakteristischen Massen 122,230,95,152	0,2
	23.6.2003	Nicht identifizierbare Substanzen mit den charakteristischen Massen 124,199,139,96,229	0,2
	23.6.2003	Nicht identifizierbare Substanzen mit den charakteristischen Massen 208,178,270,238	0,2
	23.6.2003	Nicht identifizierbare Substanzen mit den charakteristischen Massen 99,226,286,136,166,196	0,1
	28.6.2003	Nicht identifizierbare Substanzen mit den charakteristischen Massen 283,253,223,193,315	0,2
	28.6.2003	Hexa(methoxymethyl)melamin	0,3
	28.6.2003	Nicht identifizierbare Substanz mit den charakteristischen Massen 327,359,297	0,5
	28.6.2003	N-(2,6-Dimethylphenyl)-N-(methyl- 1-pyrazol)-1-pyrazolessigsäureamid	0,2
	28.6.2003	Triphenylphosphinsulfid	0,2
27. – 30.6.2003	Formylmethylen-triphenylphosphoran	0,5	
Juli	1. – 16.7.2003	Formylmethylen-triphenylphosphoran	0,7
	7. – 14.7.2003	N-(2,6-Dimethylphenyl)-N-(methyl- 1-pyrazol)-1-pyrazolessigsäureamid	0,3
	19. – 21.7.2003	Hydrodehydrolinalool	<b>19,5</b>

Monat	Probendatum von 6:00 Uhr bis 6:00 Uhr des darauf folgenden Tages	Detektierte Substanz	Über den internen Standard abgeschätztes Konzentrationsmaximum in µg/l (Probe)
<b>August</b>	12. – 17.8.2003	Nicht identifizierbare Substanzen mit den charakteristischen Massen 43,69,112,71,41,139,84,97	<b>2,2</b>
	12. – 17.8.2003	Nicht identifizierbare Substanzen mit den charakteristischen Massen 43,69,71,112,115,139,154,84	<b>6,8</b>
	22. – 27.8.2003	N-(2,6-Dimethylphenyl)-N-(methyl- 1-pyrazol)-1-pyrazolesigsäureamid	0,2
	22. – 31.8.2003	Triphenylphosphinsulfid	0,1
	28. – 30.8.2003	Nicht identifizierbare Substanzen mit den charakteristischen Massen 43,69,112,71,41,139,84,97	0,1
	28. – 30.8.2003	Nicht identifizierbare Substanzen mit den charakteristischen Massen 43,69,71,112,115,139,154,84	0,8
<b>September</b>	24. – 30.9.2003	Nicht identifizierbare Substanzen mit den charakteristischen Massen 117,116,89,197,253	0,4
	25. – 30.9.2003	Hexa(methoxymethyl)melamin	0,2
	25. – 30.9.2003	Formylmethylen-triphenylphosphoran	0,6
	25. – 30.9.2003	Triphenylphosphinsulfid	0,2
	25. – 30.9.2003	Surfynol E 102	0,1
	26.9.2003	Metazachlor	< 0,1
<b>Oktober</b>	1. – 5.10.2003	Toluidin	0,2
	1. – 5.10.2003	Formylmethylen-triphenylphosphoran	0,6
	1. – 15.10.2003	Surfynol E 102	0,4
	1. – 25.10.2003	Diazepam (Valium)	< 0,1
	9. – 19.10.2003	Triphenylphosphinsulfid	0,3



Monat	Probendatum von 6:00 Uhr bis 6:00 Uhr des darauf folgenden Tages	Detektierte Substanz	Über den internen Standard abgeschätztes Konzentrationsmaximum in µg/l (Probe)
	13. – 31.10.2003	Nicht identifizierbare Substanzen mit den charakteristischen Massen 127,109,81,155 (Lactonabkömml.)	0,8
	16. – 21.10.2003	Nicht identifizierbare Substanzen mit den charakteristischen Massen 283,253,223,193,315,179,268	0,3
	16. – 23.10.2003	Hexa(methoxymethyl)melamin	<b>1,0</b>
	16. – 19.10.2003	Nicht identifizierbare Substanz mit den charakteristischen Massen 327,359,297,163,223,267	0,5
	19. – 25.10.2003	AIPA	<b>1,1</b>
	22. – 27.10.2003	Nicht identifizierbare Substanz mit den charakteristischen Massen 83,67,55,57,41,43	0,6
	22. – 27.10.2003	N-Methylphthalimid	0,2
<b>November</b>	1. – 16.11.2003	Nicht identifizierbare Substanz mit den charakteristischen Massen 83,67,55,57,41,43	0,3
	1. – 28.11.2003	AIPA	0,2
	1. – 30.11.2003	Nicht identifizierbare Substanzen mit den charakteristischen Massen 127,109,81,155 (Lactonabkömml.)	<b>1,9</b>
	14. – 30.11.2003	Surfynol E 102	0,1
	16. – 29.11.2003	N-(2,6-Dimethylphenyl)-N-(methyl-1-pyrazol)-1-pyrazolessigsäureamid	0,2
	16. - 29.11.2003	Nicht identifizierbare Substanz mit den charakteristischen Massen 81,211,143	0,2
	16. – 29.11.2003	Formylmethylenetriphenylphosphoran	0,4
	25. – 27..11.2003	Vinclozolin	< 0,1
	27.11.2003	Triphenylphosphinsulfid	0,1
	28. – 30.11.2003	Diisopropyladipat	<b>11,0</b>

<b>Monat</b>	<b>Probendatum</b> von 6:00 Uhr bis 6:00 Uhr des darauf folgenden Tages	<b>Detektierte Substanz</b>	<b>Über den internen Standard abgeschätztes Konzentrationsmaximum in µg/l (Probe)</b>
<b>Dezember</b>	1. – 31.12.2003	Nicht identifizierbare Substanzen mit den charakteristischen Massen 127,109,81,155 (Lactonabkömml.)	2,7
	2. – 13.12.2003	Nicht identifizierbare Substanzen mit den charakteristischen Massen 171,113,131,41,57,133	0,3
	5. – 7.12.2003	Diisopropyladipat	0,3
	5. – 12.12.2003	N-(2,6-Dimethylphenyl)-N-(methyl- 1-pyrazol)-1-pyrazolessigsäureamid	0,4
	5. – 14.12.2003	Nicht identifizierbare Substanz mit den charakteristischen Massen 81,211,143	0,4
	12. – 13.12.2003	Isophoronitril	0,2
	9. – 14.12.2003	Formylmethyltriphenylphosphoran	1,7
	20. – 26.12.2003	Isophoronitril	0,5
	24. – 26.12.2003	Nicht identifizierbare Substanz mit den charakteristischen Massen 81,211,143	0,3

## Stoffliste der 2003 an der Messstelle 1 detektierten Substanzen:

## Mit Standards abgesichert identifiziert:

Alachlor  
 Anthranilsylureisopropylamid (AIPA)  
 Atrazin  
 Benzophenon  
 Carbamazepin  
 Chinaldin  
 DEET (N,N-Diethyltoluamid)  
 Diazinon  
 2,3?-Dichloranilin  
 3,5?-Dichloranilin  
 Diethylbenzole  
 2,6-Dimethylanilin (Xylidin)  
 Di-iso-propyladipinsäureester  
 Diphenylphosphinsäureethylester  
 Ethofumesate  
 Galaxolide (HHCB)  
 Hydrodehydrolinalool  
 Isophoronitril  
 Metalaxyl  
 Metazachlor  
 2-(Methylthio)-benzothiazol  
 1,8-Naphthalimid  
 N-(2,6-Dimethylphenyl)-N-(methyl-1-pyrazol)-1-pyrazolesigsäureamid  
 N-(2-Chloracetyl)-2,6-dimethylanilin  
 N,N-Diethyl-toluidin  
 N,N-Dimethylbenzamid  
 N-Butylbenzolsulfonamid  
 Surfynol E102  
 Swep  
 Toluidin  
 Tonalide  
 Tributylphosphat  
 Trimethylbenzole  
 Tetrabutylharnstoff  
 Tetramethylbenzole  
 Triphenylphosphinsulfid  
 Tris-(2-chlorethyl)-phosphat  
 Vinclozolin

## Vorschläge der NIST-Spektrenbibliothek:

Acetochlor  
 1-Amino-5-chlor-anthrachinon  
 Caren  
 1-Chlor-4-(methylsulfonyl)-benzol  
 Diazepam (Valium)  
 3,4-Dihydro-3,5,8-trimethyl-1(2H)-naphthalinon  
 4,5-Dihydro-5,5,7-trimethyl-6H-[1,2,5]oxadiazol[3,4-b][1,4]diazepin  
 3,3-Dimethyl-2-(3-methyl-1,3-butadienyl)-cyclopentanon  
 1-(2,4-Dimethylphenyl)-1-propanon  
 Diphenylsulfon  
 Equilin  
 3-Ethenyl-2,2-dimethyl-cyclopropanocarboxylsäureethylester  
 3-Ethyl-3-hydroxy-5.(alpha.)-androstan-17-on  
 6-(1-Ethylpropyl)-1,2,3,4-tetrahydro-naphthalin  
 Hexa(methoxymethyl)melamin  
 Iminostilben (Abbauprodukt Carbamezepin)  
 Kohlenwasserstoffe  
 Lactone (3 verschiedene)  
 Methansulfamid  
 7-Methoxy-2H-1-benzopyran-2-on  
 4-Methylbenzolsulfonamid  
 2-Methylindolin  
 2-Methyl-1H-isoindol-1,3(2H)-dion  
 4-(4-Methylphenylamino)-Pyrimidin-2(1H)-on  
 Methylphenylsulfon  
 N-[1-(1-naphthalenyl)ethyl]-acetamid  
 N-Ethyl-N-Phenyl-formamid  
 N-Methyl-N-phenyl-acetamid  
 Octadecensäuremethylester  
 1,2,3,4,5,6,7,8-Octahydro-acridin  
 Phenyl-diethyl-phosphorsäureester  
 5-Phenyl-3-piperidino-4-penten-1-ol  
 Pregnonolacetat  
 2-(4-Pyridyl)-1H-pyrrol[2,3-b]pyridin  
 4-sec-Butyl-acridon  
 (3 $\beta$ ,5 $\alpha$ )-Stigmastan-3-ol-5-chloracetat  
 p-Tolylmethylsulfon  
 2-tertiär-Butylanilin  
 Tertiär-Butylphenylether  
 Tetraethylharnstoff  
 2,3,5,6-Tetrahydro-3,3,4,5,8-hexamethyl-S-Indacen-1,7-dion  
 Triallyl-1,3,5-triazin-2,4,6-(1H,3H,5H)-trion  
 Triethylcitrat  
 3,3,4-Trimethyl-4-(4-methylphenyl)-cyclopentanon  
 2,4,6-Trimethylpropiophenon  
 Triphenylphosphin  
 Tris(2-Chlorpropyl)phosphat

**Nicht identifizierte Substanzen:****Die Benennung erfolgte nach ihren charakteristischen Massen.**

100,72,82,67	173,160,133
100,98,70,113,130,56	174,410,159,281 überlagert
103,59,41,87	176,191,148,178,193,150,180 enthält 2 Chlor
104,157,130	176,204,219,162
104,78	177,192,109,156
104,78,172	177,192,159,119,134,149,91,67,210
105,201,186,77	178,249,251
106,107,151,193,134	178,251,108,277
106,135,163	182,247,168,91,218,258
107,109,121,67,91,95,139,79,193,208	186,187,118,91
107,109,91,122,67,41,135,206	191,206,100,163,57,58,107,135
107,150,95,79,67,135,194	191,218,161,135,91,109
111,192,79,67,55,98,149	194,91,71,57,41,239
117,116,89,90,253,97	197,155,212,221,143,91,179,41
119,105,134,91,77,55	199,115,157,87,69,41
119,91,175,63	199,198,170,143,116
120,136,132,92,194	203,218,147,175,105
122,109,145,200,230,79,41	204,118,91,189,132
122,150,107,79,59,152	204,177
123,151,95,166,138,109,180,222,109,67	205,206,145,119,161
124,139,199,41,185	205,206,207,208,116,77,51,143,171
125,196,153,139,55,79,91	206,153,221,91 überlagert
129,262	208,178,238,270,148
129,128	211,147,244,127,167
129,156	212,227,185,286
129,111,147 Adipinsäureester	212,257,86
132,117,91,257	213,212,185,198,,171,157,144,130,116,102
132,129,117,145,52,217	213,256,157,101,143,200,132,41
132,143,150,117,107,115,91,79,169	216,177,150,243,91,258 überlagert
132,150,262	219,191,234,173,249,251
134,118,221,78,91,51,345	225,243,69,115,155,84,297,197,41,312
135,153,10793,162,177,79	226,98,129?,42,58,69,83
135,94,166	227,226,130,170,197
135,95,150	227,241,257,209,167,272,181,149
140,83,196,69,167	227,242,143,128
141,169,57,85,170	229,271,91
141,171,86,95,79,111	232,189,133,217,147,175,105,91
142,141,115	236,165,208,147,79
143,115,171	239,205,241,240,242,91,129
146,128,161	244,195,279,224,260
146,91,77,117,160,50	247,173,105,275
147,119,91,77	249,264,105,189,77
147,146	252,119,161,145,338,227
152,180,113	252,251,253,254
152,236,137,91,67	254,211,239,226,155,128
153,152,151,150,109,129	254,161,256,163,176,178,224
153,196,181	255,151,195,225,165
155,84,112,137	256,41
155,84,112,241,281,299,197	256,144,129,105
159,286,288,257	257,201,239,272
160,175,132,117	257,229,259,201
161,176,206	262,347,288
162,163,95,147,79	268,270,161,163,176,178,224,379,381
165,137,180,205,221,109,91	270,143,171,185,157,129,101,227,199,213,241,115,87,55,43
166,110,91,79,93	271,211,151,181,196
167,152	277,239,309,396,381
167,210,67,92,149,83,98,111,121	278,279,263
168,109,67,93,205	283,315,223,253,193
168,167,121,93,67,112	302,204,148,174,91,79

313,268,270,282,121,198,153  
317,286,301,116,271,91  
318,275,241,131,91,191  
320,261,235,277,146  
320,383,277,340,225  
322,307,265  
327,359,297,163  
338,282,323,173,360  
341,359,208  
381,338,366,277,206  
41,43,71,89,143,173  
41,57,113,171  
41,69,83,100,99,71,43,53,112,175  
43,41,71,173,243  
43,69,112,41,71,84,97,139,154  
43,69,71,41,112,115,139,154  
44,142,241  
44,144  
44,159  
44,40  
59,43,58,45,87  
63,65,59,45,95,107  
67,124,139,109,79,91,193,165,41  
67,69,97,83,55,57,111,125,41  
67,95  
67,96,152,180  
68,107,141  
68,43,83,107  
69,115,41

312,277,215,330,188,159  
69,41,105,107  
69,95,111,110,67,191  
69,95,111,41,70,57,85  
71,132,41,85,91  
72,129,165,192,215,263  
73,277  
75,47,149,99  
75,47,157  
79,163,178,77,91  
79,178,162,163,164,165,43,94,107,121,135  
79,95,109,122,145,182,230  
80,43  
81,211,229,143,121,91  
81,95,67,123,152,109,139,41  
82,110,67,181,166,123,91  
82,124,180,138,202  
82,97  
83,67,57  
83,98,112,161,190,208,67  
85,73,157,127,120  
87,102,73,55,83,127,143,171  
91,155,171,172,184,199  
91,93,79,67,107,117,134,281  
95,141,67,186,81,109  
95,192,98,67,79,110,111,83,91,77,55  
97,156  
99,147,159,129,83,85,69,41,113,57  
99,226,286,166,136,196,69



**Konzentrationsverläufe der Auffälligkeiten MWL 1 2003**





## GC/MS-Screening auf organische Spurenstoffe

### Auffällige Substanz:

Formylmethylen-triphenylphosphoran

im Rhein bei Worms

Messwasserleitung 1 (linksrheinisch)

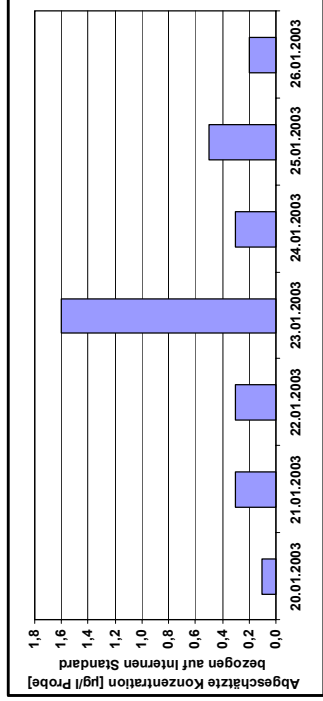
in der 24-h-Mischprobe vom 23.01.2003 6:00 Uhr MEZ  
bis 24.01.2003 6:00 Uhr MEZ

- Die Substanz wurde mit einem Standard abgesichert.  
 Die Substanz wurde nicht mit einem Standard abgesichert.  
 Es handelt sich um einen Vorschlag der NIST-Spektrenbibliothek.  
 Die NIST-Spektrenbibliothek liefert keinen guten Vorschlag.

Ergebnisse der letzten Tage (MEZ):

Probe vom	Abschätzung der Konzentration über den Internen Standard [µg/l]
20.01.2003 6:00 Uhr - 21.01.2003 6:00 Uhr	0,1
21.01.2003 6:00 Uhr - 22.01.2003 6:00 Uhr	0,3
22.01.2003 6:00 Uhr - 23.01.2003 6:00 Uhr	0,3
23.01.2003 6:00 Uhr - 24.01.2003 6:00 Uhr	1,6
24.01.2003 6:00 Uhr - 25.01.2003 6:00 Uhr	0,3
25.01.2003 6:00 Uhr - 26.01.2003 6:00 Uhr	0,5
26.01.2003 6:00 Uhr - 27.01.2003 6:00 Uhr	0,2

Die Substanzkonzentration wurde nur über den internen Standard abgeschatzt. Wiederfindungsraten und Responsefaktoren wurden **nicht** berücksichtigt.



Rheingütestation Worms

## GC/MS-Screening auf organische Spurenstoffe

### Auffällige Substanz:

Formylmethylen-triphenylphosphoran

im Rhein bei Worms

Messwasserleitung 1 (linksrheinisch)

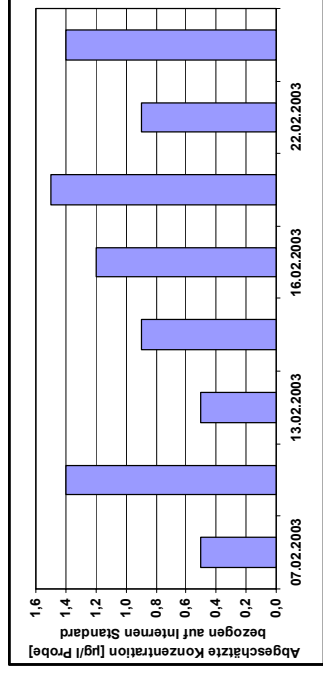
in der 24-h-Mischprobe vom 10.02.2003 6:00 Uhr MEZ  
bis 13.02.2003 6:00 Uhr MEZ

- Die Substanz wurde mit einem Standard abgesichert.  
 Die Substanz wurde nicht mit einem Standard abgesichert.  
 Es handelt sich um einen Vorschlag der NIST-Spektrenbibliothek.  
 Die NIST-Spektrenbibliothek liefert keinen guten Vorschlag.

Ergebnisse der letzten Tage (MEZ):

Probe vom	Abschätzung der Konzentration über den Internen Standard [µg/l]
07.02.2003 6:00 Uhr - 10.02.2003 6:00 Uhr	0,5
10.02.2003 6:00 Uhr - 13.02.2003 6:00 Uhr	1,4
13.02.2003 6:00 Uhr - 14.02.2003 7:30 Uhr	0,5
14.02.2003 7:30 Uhr - 16.02.2003 6:00 Uhr	0,9
16.02.2003 6:00 Uhr - 19.02.2003 6:00 Uhr	1,2
19.02.2003 6:00 Uhr - 22.02.2003 6:00 Uhr	1,5
22.02.2003 6:00 Uhr - 25.02.2003 6:00 Uhr	0,9
25.02.2003 6:00 Uhr - 27.02.2003 7:00 Uhr	1,4

Die Substanzkonzentration wurde nur über den internen Standard abgeschatzt. Wiederfindungsraten und Responsefaktoren wurden **nicht** berücksichtigt.



Rheingütestation Worms

## GC/MS-Screening auf organische Spurenstoffe

### Auffällige Substanz: Charakteristische Massen 167,67,210

im Rhein bei Worms

Messwasserleitung 1 (linksrheinisch)

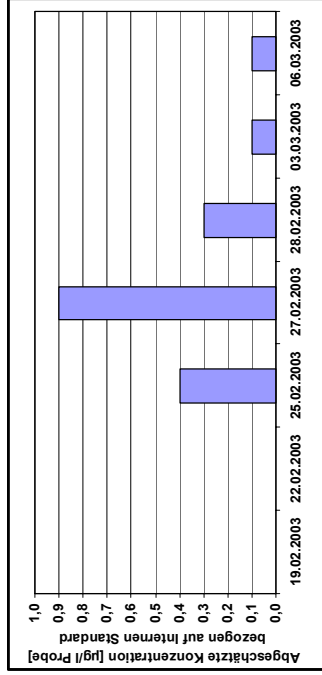
in der 24-h-Mischprobe vom 27.02.2003 6:00 Uhr MEZ  
bis 28.02.2003 6:00 Uhr MEZ

- Die Substanz wurde mit einem Standard abgesichert.  
 Die Substanz wurde nicht mit einem Standard abgesichert.  
 Es handelt sich um einen Vorschlag der NIST-Spektrenbibliothek.  
 Die NIST-Spektrenbibliothek liefert keinen guten Vorschlag.

Ergebnisse der letzten Tage (MEZ):

Probe vom	Abschätzung der Konzentration über den internen Standard [ $\mu\text{g/l}$ ]
19.02.2003 6:00 Uhr - 22.02.2003 6:00 Uhr	0,0
22.02.2003 6:00 Uhr - 25.02.2003 6:00 Uhr	0,0
25.02.2003 6:00 Uhr - 27.02.2003 6:00 Uhr	0,4
27.02.2003 6:00 Uhr - 28.02.2003 6:00 Uhr	0,9
28.02.2003 6:00 Uhr - 03.03.2003 6:00 Uhr	0,3
03.03.2003 6:00 Uhr - 06.03.2003 6:00 Uhr	0,1
06.03.2003 6:00 Uhr - 09.03.2003 6:00 Uhr	0,1

Die Substanzkonzentration wurde nur über den internen Standard abgeschätzt. Wiederfindungsraten und Responsefaktoren wurden nicht berücksichtigt.



Rheingütestation Worms

## GC/MS-Screening auf organische Spurenstoffe

### Auffällige Substanz: Charakteristische Massen 111,192,79,67

im Rhein bei Worms

Messwasserleitung 1 (linksrheinisch)

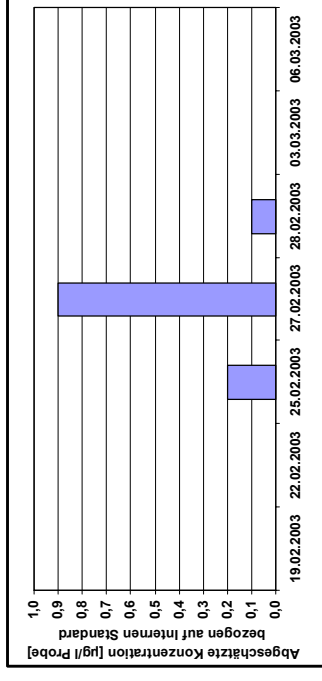
in der 24-h-Mischprobe vom 27.02.2003 6:00 Uhr MEZ  
bis 28.02.2003 6:00 Uhr MEZ

- Die Substanz wurde mit einem Standard abgesichert.  
 Die Substanz wurde nicht mit einem Standard abgesichert.  
 Es handelt sich um einen Vorschlag der NIST-Spektrenbibliothek.  
 Die NIST-Spektrenbibliothek liefert keinen guten Vorschlag.

Ergebnisse der letzten Tage (MEZ):

Probe vom	Abschätzung der Konzentration über den internen Standard [ $\mu\text{g/l}$ ]
19.02.2003 6:00 Uhr - 22.02.2003 6:00 Uhr	0,0
22.02.2003 6:00 Uhr - 25.02.2003 6:00 Uhr	0,0
25.02.2003 6:00 Uhr - 27.02.2003 6:00 Uhr	0,2
27.02.2003 6:00 Uhr - 28.02.2003 6:00 Uhr	0,9
28.02.2003 6:00 Uhr - 03.03.2003 6:00 Uhr	0,1
03.03.2003 6:00 Uhr - 06.03.2003 6:00 Uhr	0,0
06.03.2003 6:00 Uhr - 09.03.2003 6:00 Uhr	0,0

Die Substanzkonzentration wurde nur über den internen Standard abgeschätzt. Wiederfindungsraten und Responsefaktoren wurden nicht berücksichtigt.



Rheingütestation Worms

## GC/MS-Screening auf organische Spurenstoffe

### Auffällige Substanz:

Formylimethylen-  
triphenylphosphoran

im Rhein bei Worms

Messwasserleitung 1 (linksrheinisch)

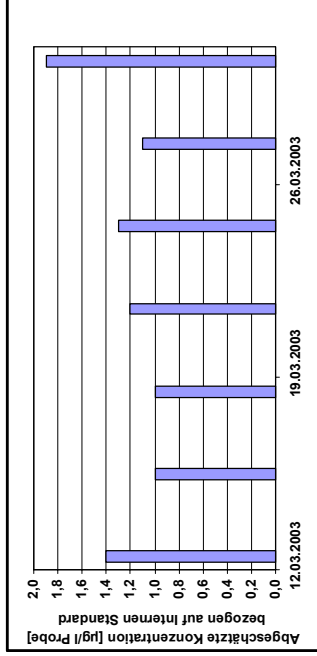
in der 24-h-Mischprobe vom 12.03.2003 6:00 Uhr MEZ  
bis 02.04.2003 6:00 Uhr MEZ

- Die Substanz wurde mit einem Standard abgesichert.  
 Die Substanz wurde nicht mit einem Standard abgesichert.  
 Es handelt sich um einen Vorschlag der NIST-Spektrenbibliothek.  
 Die NIST-Spektrenbibliothek liefert keinen guten Vorschlag.

Ergebnisse der letzten Tage (MEZ):

Probe vom	Abschätzung der Konzentration über den internen Standard [µg/l]
12.03.2003 6:00 Uhr - 15.03.2003 6:00 Uhr	1,4
15.03.2003 6:00 Uhr - 18.03.2003 6:00 Uhr	1,0
18.03.2003 6:00 Uhr - 21.03.2003 6:00 Uhr	1,0
21.03.2003 6:00 Uhr - 24.03.2003 6:00 Uhr	1,2
24.03.2003 6:00 Uhr - 27.03.2003 6:00 Uhr	1,3
27.03.2003 6:00 Uhr - 30.03.2003 6:00 Uhr	1,1
30.03.2003 6:00 Uhr - 02.04.2003 6:00 Uhr	1,9

Die Substanzkonzentration wurde nur über den internen Standard abgeschätzt. Wiederfindungsraten und Responsefaktoren wurden nicht berücksichtigt.



Rheingütestation Worms

## GC/MS-Screening auf organische Spurenstoffe

### Auffällige Substanz:

Hexa(methoxymethyl)melamin

im Rhein bei Worms

Messwasserleitung 1 (linksrheinisch)

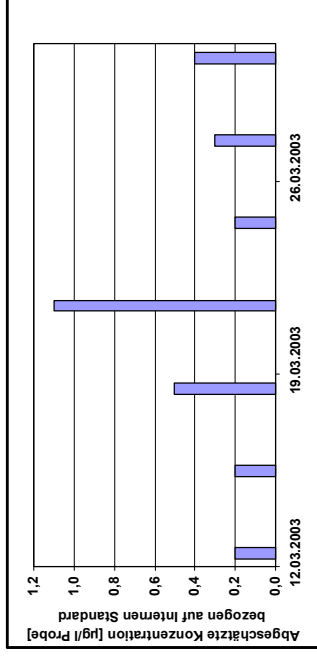
in der 24-h-Mischprobe vom 21.03.2003 6:00 Uhr MEZ  
bis 24.03.2003 6:00 Uhr MEZ

- Die Substanz wurde mit einem Standard abgesichert.  
 Die Substanz wurde nicht mit einem Standard abgesichert.  
 Es handelt sich um einen Vorschlag der NIST-Spektrenbibliothek.  
 Die NIST-Spektrenbibliothek liefert keinen guten Vorschlag.

Ergebnisse der letzten Tage (MEZ):

Probe vom	Abschätzung der Konzentration über den internen Standard [µg/l]
12.03.2003 6:00 Uhr - 15.03.2003 6:00 Uhr	0,2
15.03.2003 6:00 Uhr - 18.03.2003 6:00 Uhr	0,2
18.03.2003 6:00 Uhr - 21.03.2003 6:00 Uhr	0,5
21.03.2003 6:00 Uhr - 24.03.2003 6:00 Uhr	1,1
24.03.2003 6:00 Uhr - 27.03.2003 6:00 Uhr	0,2
27.03.2003 6:00 Uhr - 30.03.2003 6:00 Uhr	0,3
30.03.2003 6:00 Uhr - 02.04.2003 6:00 Uhr	0,4

Die Substanzkonzentration wurde nur über den internen Standard abgeschätzt. Wiederfindungsraten und Responsefaktoren wurden nicht berücksichtigt.



Rheingütestation Worms

## GC/MS-Screening auf organische Spurenstoffe

**N-(2,6-Dimethylphenyl)-N-(methyl-1-pyrazol)-1-pyrazolesigsäureamid**

### Auffällige Substanz:

im Rhein bei Worms

Messwasserleitung 1 (linksrheinisch)

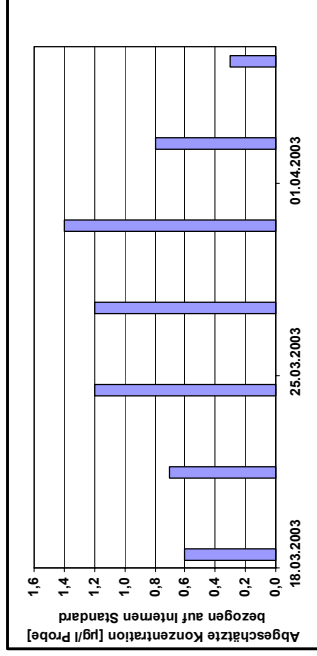
in der 24-h-Mischprobe vom 24.03.2003 6:00 Uhr MEZ  
bis 31.03.2003 6:00 Uhr MEZ

- Die Substanz wurde mit einem Standard abgesichert.  
 Die Substanz wurde nicht mit einem Standard abgesichert.  
 Es handelt sich um einen Vorschlag der NIST-Spektrenbibliothek.  
 Die NIST-Spektrenbibliothek liefert keinen guten Vorschlag.

Ergebnisse der letzten Tage (MEZ):

Probe vom	Abschätzung der Konzentration über den Internen Standard [µg/l]
18.03.2003 6:00 Uhr - 21.03.2003 6:00 Uhr	0,6
21.03.2003 6:00 Uhr - 24.03.2003 6:00 Uhr	0,7
24.03.2003 6:00 Uhr - 27.03.2003 6:00 Uhr	1,2
27.03.2003 6:00 Uhr - 30.03.2003 6:00 Uhr	1,2
30.03.2003 6:00 Uhr - 02.04.2003 6:00 Uhr	1,4
02.04.2003 6:00 Uhr - 05.04.2003 6:00 Uhr	0,8
05.04.2003 6:00 Uhr - 08.04.2003 6:00 Uhr	0,3

Die Substanzkonzentration wurde nur über den Internen Standard abgeschätzt. Wiederfindungsraten und Responsefaktoren wurden nicht berücksichtigt.



Rheingütestation Worms

## GC/MS-Screening auf organische Spurenstoffe

**Formylimethylen-triphenylphosphoran**

### Auffällige Substanz:

im Rhein bei Worms

Messwasserleitung 1 (linksrheinisch)

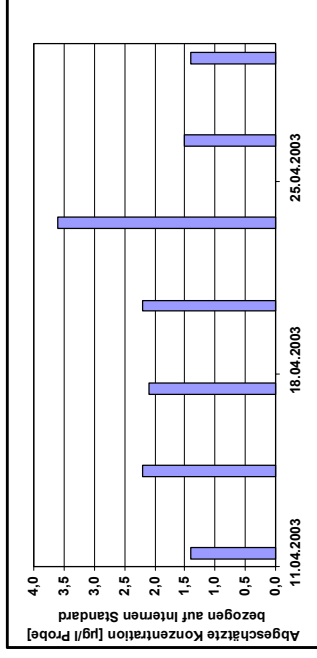
in der 24-h-Mischprobe vom 23.04.2003 6:00 Uhr MEZ  
bis 26.04.2003 6:00 Uhr MEZ

- Die Substanz wurde mit einem Standard abgesichert.  
 Die Substanz wurde nicht mit einem Standard abgesichert.  
 Es handelt sich um einen Vorschlag der NIST-Spektrenbibliothek.  
 Die NIST-Spektrenbibliothek liefert keinen guten Vorschlag.

Ergebnisse der letzten Tage (MEZ):

Probe vom	Abschätzung der Konzentration über den Internen Standard [µg/l]
11.04.2003 6:00 Uhr - 14.04.2003 6:00 Uhr	1,4
14.04.2003 6:00 Uhr - 17.04.2003 6:00 Uhr	2,2
17.04.2003 6:00 Uhr - 20.04.2003 6:00 Uhr	2,1
20.04.2003 6:00 Uhr - 23.04.2003 6:00 Uhr	2,2
23.04.2003 6:00 Uhr - 26.04.2003 6:00 Uhr	3,6
26.04.2003 6:00 Uhr - 29.04.2003 6:00 Uhr	1,5
29.04.2003 6:00 Uhr - 02.05.2003 6:00 Uhr	1,4

Die Substanzkonzentration wurde nur über den Internen Standard abgeschätzt. Wiederfindungsraten und Responsefaktoren wurden nicht berücksichtigt.



Rheingütestation Worms

## GC/MS-Screening auf organische Spurenstoffe

### Auffällige Substanz:

Formylmethyl-  
triphenylphosphoran

im Rhein bei Worms

Messwasserleitung 1 (linksrheinisch)

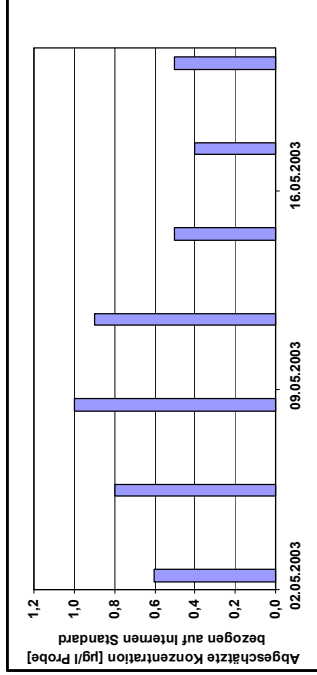
in der 24-h-Mischprobe vom 08.05.2003 6:00 Uhr MEZ  
bis 11.05.2003 6:00 Uhr MEZ

- Die Substanz wurde mit einem Standard abgesichert.  
 Die Substanz wurde nicht mit einem Standard abgesichert.  
 Es handelt sich um einen Vorschlag der NIST-Spektrenbibliothek.  
 Die NIST-Spektrenbibliothek liefert keinen guten Vorschlag.

Ergebnisse der letzten Tage (MEZ):

Probe vom	Abschätzung der Konzentration über den Internen Standard [µg/l]
02.05.2003 6:00 Uhr - 05.05.2003 6:00 Uhr	0,6
05.05.2003 6:00 Uhr - 08.05.2003 6:00 Uhr	0,8
08.05.2003 6:00 Uhr - 11.05.2003 6:00 Uhr	1,0
11.05.2003 6:00 Uhr - 14.05.2003 6:00 Uhr	0,9
14.05.2003 6:00 Uhr - 17.05.2003 6:00 Uhr	0,5
17.05.2003 6:00 Uhr - 20.05.2003 6:00 Uhr	0,4
20.05.2003 6:00 Uhr - 21.05.2003 6:00 Uhr	0,5

Die Substanzkonzentration wurde nur über den internen Standard abgeschätzt. Wiederfindungsraten und Responsefaktoren wurden nicht berücksichtigt.



Rheingütestation Worms

## GC/MS-Screening auf organische Spurenstoffe

### Auffällige Substanz:

Hydrodehydroinalool

im Rhein bei Worms

Messwasserleitung 1 (linksrheinisch)

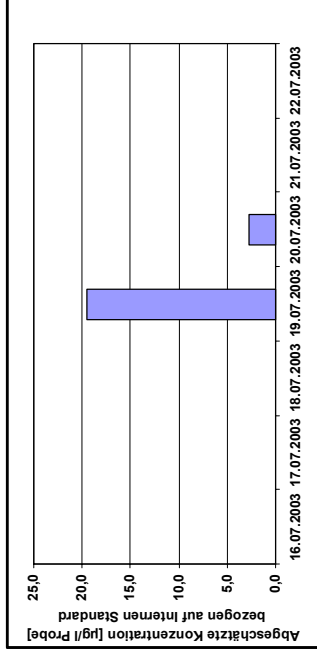
in der 24-h-Mischprobe vom 19.07.2003 6:00 Uhr MEZ  
bis 20.07.2003 6:00 Uhr MEZ

- Die Substanz wurde mit einem Standard abgesichert.  
 Die Substanz wurde nicht mit einem Standard abgesichert.  
 Es handelt sich um einen Vorschlag der NIST-Spektrenbibliothek.  
 Die NIST-Spektrenbibliothek liefert keinen guten Vorschlag.

Ergebnisse der letzten Tage (MEZ):

Probe vom	Abschätzung der Konzentration über den Internen Standard [µg/l]
16.07.2003 6:00 Uhr - 17.07.2003 6:00 Uhr	0,0
17.07.2003 6:00 Uhr - 18.07.2003 6:00 Uhr	0,0
18.07.2003 6:00 Uhr - 19.07.2003 6:00 Uhr	0,0
19.07.2003 6:00 Uhr - 20.07.2003 6:00 Uhr	19,5
20.07.2003 6:00 Uhr - 21.07.2003 6:00 Uhr	2,7
21.07.2003 6:00 Uhr - 22.07.2003 6:00 Uhr	0,0
22.07.2003 6:00 Uhr - 23.07.2003 6:00 Uhr	0,0

Die Substanzkonzentration wurde nur über den internen Standard abgeschätzt. Wiederfindungsraten und Responsefaktoren wurden nicht berücksichtigt.



Rheingütestation Worms

## GC/MS-Screening auf organische Spurenstoffe

**Auffällige Substanz:**  
 Charakteristische Massen  
 43,69,71,112,115,139,154,84

im Rhein bei Worms

Messwasserleitung 1 (linksrheinisch)

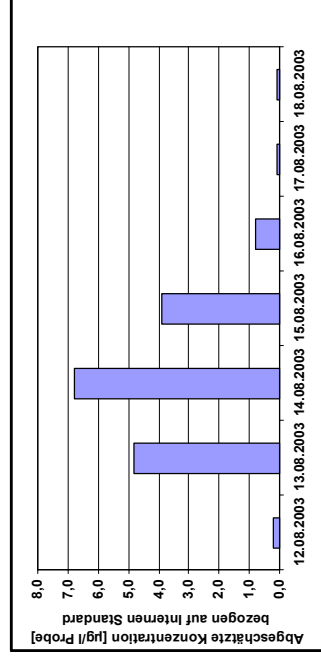
in der 24-h-Mischprobe vom 14.08.2003 6:00 Uhr MEZ  
 bis 15.08.2003 6:00 Uhr MEZ

- Die Substanz wurde mit einem Standard abgesichert.  
 Die Substanz wurde nicht mit einem Standard abgesichert.  
 Es handelt sich um einen Vorschlag der NIST-Spektrenbibliothek.  
 Die NIST-Spektrenbibliothek liefert keinen guten Vorschlag.

Ergebnisse der letzten Tage (MEZ):

Probe vom	Abschätzung der Konzentration über den internen Standard [µg/l]
12.08.2003 6:00 Uhr - 13.08.2003 6:00 Uhr	0,2
13.08.2003 6:00 Uhr - 14.08.2003 6:00 Uhr	4,8
14.08.2003 6:00 Uhr - 15.08.2003 6:00 Uhr	6,8
15.08.2003 6:00 Uhr - 16.08.2003 6:00 Uhr	3,9
16.08.2003 6:00 Uhr - 17.08.2003 6:00 Uhr	0,8
17.08.2003 6:00 Uhr - 18.08.2003 6:00 Uhr	0,1
18.08.2003 6:00 Uhr - 19.08.2003 6:00 Uhr	0,1

Die Substanzkonzentration wurde nur über den internen Standard abgeschätzt. Wiederfindungsraten und Responsefaktoren wurden nicht berücksichtigt.



Rheingütestation Worms

## GC/MS-Screening auf organische Spurenstoffe

**Auffällige Substanz:**  
 Charakteristische Massen  
 43,69,112,71,41,139,84,97

im Rhein bei Worms

Messwasserleitung 1 (linksrheinisch)

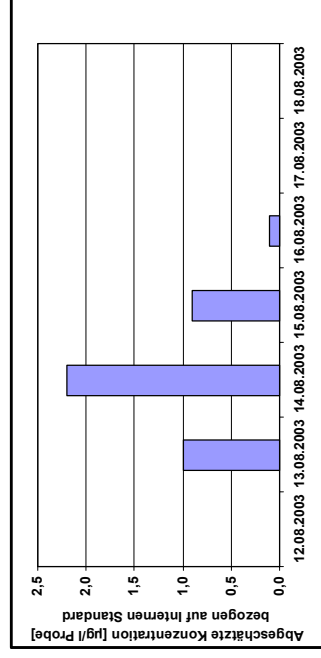
in der 24-h-Mischprobe vom 14.08.2003 6:00 Uhr MEZ  
 bis 15.08.2003 6:00 Uhr MEZ

- Die Substanz wurde mit einem Standard abgesichert.  
 Die Substanz wurde nicht mit einem Standard abgesichert.  
 Es handelt sich um einen Vorschlag der NIST-Spektrenbibliothek.  
 Die NIST-Spektrenbibliothek liefert keinen guten Vorschlag.

Ergebnisse der letzten Tage (MEZ):

Probe vom	Abschätzung der Konzentration über den internen Standard [µg/l]
12.08.2003 6:00 Uhr - 13.08.2003 6:00 Uhr	0,0
13.08.2003 6:00 Uhr - 14.08.2003 6:00 Uhr	1,0
14.08.2003 6:00 Uhr - 15.08.2003 6:00 Uhr	2,2
15.08.2003 6:00 Uhr - 16.08.2003 6:00 Uhr	0,9
16.08.2003 6:00 Uhr - 17.08.2003 6:00 Uhr	0,1
17.08.2003 6:00 Uhr - 18.08.2003 6:00 Uhr	0,0
18.08.2003 6:00 Uhr - 19.08.2003 6:00 Uhr	0,0

Die Substanzkonzentration wurde nur über den internen Standard abgeschätzt. Wiederfindungsraten und Responsefaktoren wurden nicht berücksichtigt.



Rheingütestation Worms

## GC/MS-Screening auf organische Spurenstoffe

### Auffällige Substanz:

Hexa(methoxymethyl)melamin

im Rhein bei Worms

Messwasserleitung 1 (linksrheinisch)

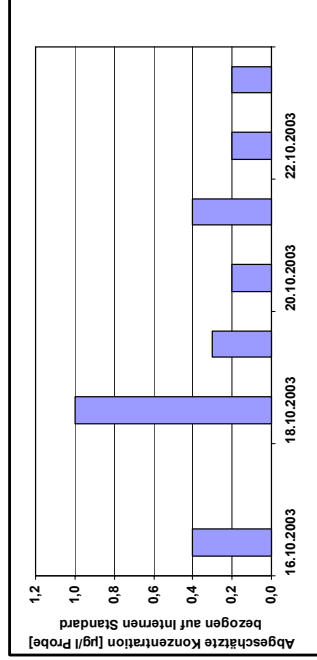
in der 24-h-Mischprobe vom 18.10.2003 6:00 Uhr MEZ  
bis 19.10.2003 6:00 Uhr MEZ

- Die Substanz wurde mit einem Standard abgesichert.  
 Die Substanz wurde nicht mit einem Standard abgesichert.  
 Es handelt sich um einen Vorschlag der NIST-Spektrenbibliothek.  
 Die NIST-Spektrenbibliothek liefert keinen guten Vorschlag.

### Ergebnisse der letzten Tage (MEZ):

Probe vom	Abschätzung der Konzentration über den internen Standard [µg/l]
16.10.2003 6:00 Uhr - 17.10.2003 6:00 Uhr	0,4
17.10.2003 6:00 Uhr - 18.10.2003 6:00 Uhr	keine Probe
18.10.2003 6:00 Uhr - 19.10.2003 6:00 Uhr	1,0
19.10.2003 6:00 Uhr - 20.10.2003 6:00 Uhr	0,3
20.10.2003 6:00 Uhr - 21.10.2003 6:00 Uhr	0,2
21.10.2003 6:00 Uhr - 22.10.2003 6:00 Uhr	0,4
22.10.2003 6:00 Uhr - 23.10.2003 6:00 Uhr	0,2
23.10.2003 6:00 Uhr - 24.10.2003 6:00 Uhr	0,2

Die Substanzkonzentration wurde nur über den internen Standard abgeschätzt. Wiederfindungsraten und Responsefaktoren wurden **nicht** berücksichtigt.



Rheingütestation Worms

## GC/MS-Screening auf organische Spurenstoffe

### Auffällige Substanz:

Anthranilsäure-isopropylamid (AIPA)

im Rhein bei Worms

Messwasserleitung 1 (linksrheinisch)

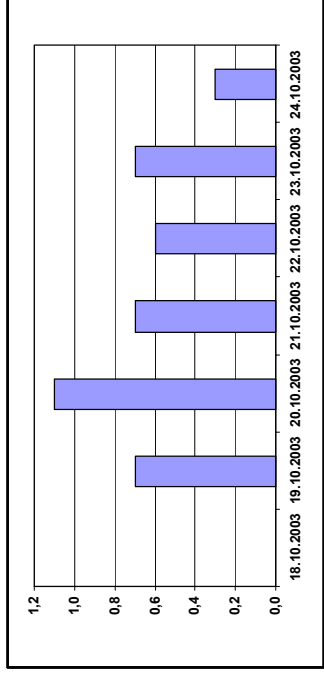
in der 24-h-Mischprobe vom 20.10.2003 6:00 Uhr MEZ  
bis 21.10.2003 6:00 Uhr MEZ

- Die Substanz wurde mit einem Standard abgesichert.  
 Die Substanz wurde nicht mit einem Standard abgesichert.  
 Es handelt sich um einen Vorschlag der NIST-Spektrenbibliothek.  
 Die NIST-Spektrenbibliothek liefert keinen guten Vorschlag.

### Ergebnisse der letzten Tage (MEZ):

Probe vom	Abschätzung der Konzentration über den internen Standard [µg/l]
18.10.2003 6:00 Uhr - 19.10.2003 6:00 Uhr	0,0
19.10.2003 6:00 Uhr - 20.10.2003 6:00 Uhr	0,7
20.10.2003 6:00 Uhr - 21.10.2003 6:00 Uhr	1,1
21.10.2003 6:00 Uhr - 22.10.2003 6:00 Uhr	0,7
22.10.2003 6:00 Uhr - 23.10.2003 6:00 Uhr	0,6
23.10.2003 6:00 Uhr - 24.10.2003 6:00 Uhr	0,7
24.10.2003 6:00 Uhr - 25.10.2003 6:00 Uhr	0,3

Die Substanzkonzentration wurde nur über den internen Standard abgeschätzt. Wiederfindungsraten und Responsefaktoren wurden **nicht** berücksichtigt.



Rheingütestation Worms

## GC/MS-Screening auf organische Spurenstoffe

**Auffällige Substanz:** Massen 127,109,81,155

im Rhein bei Worms

Messwasserleitung 1 (linksrheinisch)

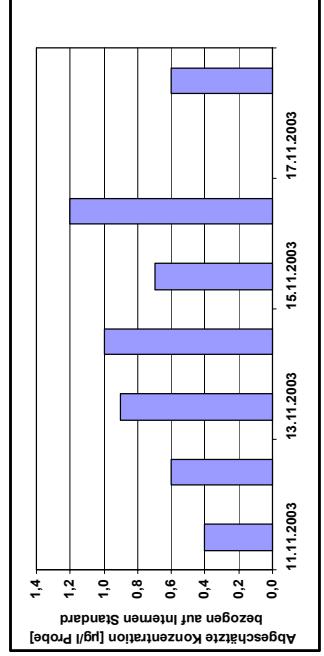
in der 24-h-Mischprobe vom 14.11.2003 6:00 Uhr MEZ  
bis 15.11.2003 6:00 Uhr MEZ

- Die Substanz wurde mit einem Standard abgesichert.  
 Die Substanz wurde nicht mit einem Standard abgesichert.  
 Es handelt sich um einen Vorschlag der NIST-Spektrenbibliothek.  
 Die NIST-Spektrenbibliothek liefert keinen guten Vorschlag.

Ergebnisse der letzten Tage (MEZ):

Probe vom	Abschätzung der Konzentration über den internen Standard [µg/l]
11.11.2003 6:00 Uhr - 12.11.2003 6:00 Uhr	0,4
12.11.2003 6:00 Uhr - 13.11.2003 6:00 Uhr	0,6
13.11.2003 6:00 Uhr - 14.11.2003 6:00 Uhr	0,9
14.11.2003 6:00 Uhr - 15.11.2003 6:00 Uhr	1,0
15.11.2003 6:00 Uhr - 16.11.2003 6:00 Uhr	0,7
16.11.2003 6:00 Uhr - 17.11.2003 6:00 Uhr	1,2
17.11.2003 6:00 Uhr - 18.11.2003 6:00 Uhr	keine Probe
18.11.2003 6:00 Uhr - 19.11.2003 6:00 Uhr	0,6

Die Substanzkonzentration wurde nur über den internen Standard abgeschätzt. Wiederfindungsraten und Responsefaktoren wurden **nicht** berücksichtigt.



Rheingütestation Worms

## GC/MS-Screening auf organische Spurenstoffe

**Auffällige Substanz:** Massen 127,109,81,155

im Rhein bei Worms

Messwasserleitung 1 (linksrheinisch)

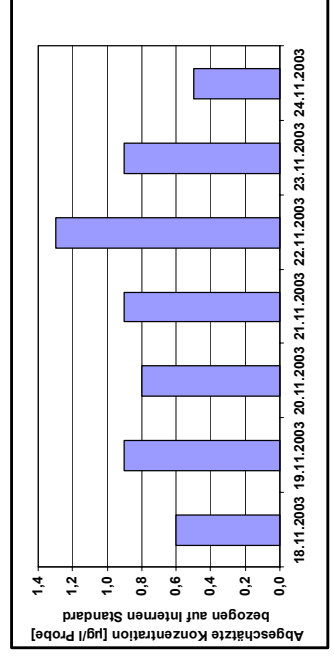
in der 24-h-Mischprobe vom 22.11.2003 6:00 Uhr MEZ  
bis 23.11.2003 6:00 Uhr MEZ

- Die Substanz wurde mit einem Standard abgesichert.  
 Die Substanz wurde nicht mit einem Standard abgesichert.  
 Es handelt sich um einen Vorschlag der NIST-Spektrenbibliothek.  
 Die NIST-Spektrenbibliothek liefert keinen guten Vorschlag.

Ergebnisse der letzten Tage (MEZ):

Probe vom	Abschätzung der Konzentration über den internen Standard [µg/l]
18.11.2003 6:00 Uhr - 19.11.2003 6:00 Uhr	0,6
19.11.2003 6:00 Uhr - 20.11.2003 6:00 Uhr	0,9
20.11.2003 6:00 Uhr - 21.11.2003 6:00 Uhr	0,8
21.11.2003 6:00 Uhr - 22.11.2003 6:00 Uhr	0,9
22.11.2003 6:00 Uhr - 23.11.2003 6:00 Uhr	1,3
23.11.2003 6:00 Uhr - 24.11.2003 6:00 Uhr	0,9
24.11.2003 6:00 Uhr - 25.11.2003 6:00 Uhr	0,5

Die Substanzkonzentration wurde nur über den internen Standard abgeschätzt. Wiederfindungsraten und Responsefaktoren wurden **nicht** berücksichtigt.



Rheingütestation Worms



## GC/MS-Screening auf organische Spurenstoffe

### Auffällige Substanz:

**Massen 127, 109, 81, 155**

im Rhein bei Worms

Messwasserleitung 1 (linksrheinisch)

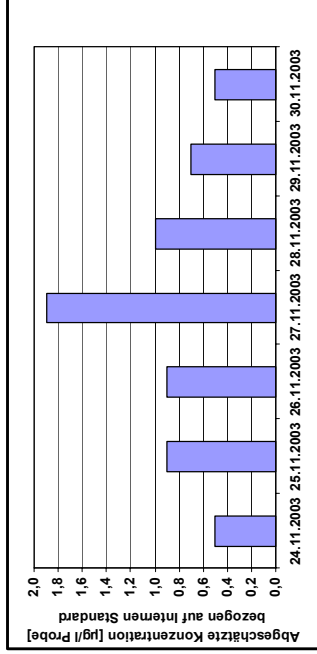
in der 24-h-Mischprobe vom 27.11.2003 6:00 Uhr MEZ  
bis 28.11.2003 6:00 Uhr MEZ

- Die Substanz wurde mit einem Standard abgesichert.  
 Die Substanz wurde nicht mit einem Standard abgesichert.  
 Es handelt sich um einen Vorschlag der NIST-Spektrenbibliothek.  
 Die NIST-Spektrenbibliothek liefert keinen guten Vorschlag.

Ergebnisse der letzten Tage (MEZ):

Probe vom	Abschätzung der Konzentration über den Internen Standard [µg/l]
24.11.2003 6:00 Uhr - 25.11.2003 6:00 Uhr	0,5
25.11.2003 6:00 Uhr - 26.11.2003 6:00 Uhr	0,9
26.11.2003 6:00 Uhr - 27.11.2003 6:00 Uhr	0,9
27.11.2003 6:00 Uhr - 28.11.2003 6:00 Uhr	1,9
28.11.2003 6:00 Uhr - 29.11.2003 6:00 Uhr	1,0
29.11.2003 6:00 Uhr - 30.11.2003 6:00 Uhr	0,7
30.11.2003 6:00 Uhr - 01.12.2003 6:00 Uhr	0,5

Die Substanzkonzentration wurde nur über den Internen Standard abgeschätzt. Wiederfindungsraten und Responsefaktoren wurden nicht berücksichtigt.



Rheingütestation Worms

## GC/MS-Screening auf organische Spurenstoffe

### Auffällige Substanz:

**Diisopropyladipat**

im Rhein bei Worms

Messwasserleitung 1 (linksrheinisch)

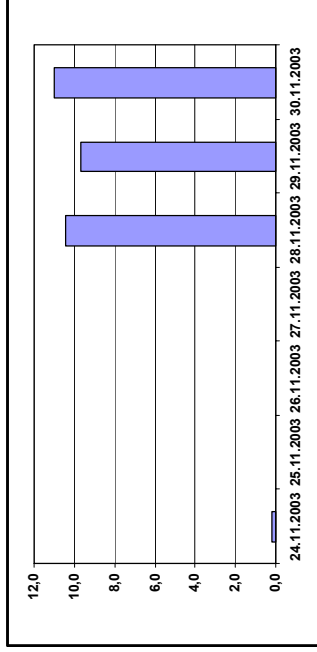
in der 24-h-Mischprobe vom 28.11.2003 6:00 Uhr MEZ  
bis 29.11.2003 6:00 Uhr MEZ

- Die Substanz wurde mit einem Standard abgesichert.  
 Die Substanz wurde nicht mit einem Standard abgesichert.  
 Es handelt sich um einen Vorschlag der NIST-Spektrenbibliothek.  
 Die NIST-Spektrenbibliothek liefert keinen guten Vorschlag.

Ergebnisse der letzten Tage (MEZ):

Probe vom	Abschätzung der Konzentration über den Internen Standard [µg/l]
24.11.2003 6:00 Uhr - 25.11.2003 6:00 Uhr	0,2
25.11.2003 6:00 Uhr - 26.11.2003 6:00 Uhr	0,0
26.11.2003 6:00 Uhr - 27.11.2003 6:00 Uhr	0,0
27.11.2003 6:00 Uhr - 28.11.2003 6:00 Uhr	0,0
28.11.2003 6:00 Uhr - 29.11.2003 6:00 Uhr	10,4
29.11.2003 6:00 Uhr - 30.11.2003 6:00 Uhr	9,7
30.11.2003 6:00 Uhr - 01.12.2003 6:00 Uhr	11,0

Die Substanzkonzentration wurde nur über den Internen Standard abgeschätzt. Wiederfindungsraten und Responsefaktoren wurden nicht berücksichtigt.



Rheingütestation Worms

## GC/MS-Screening auf organische Spurenstoffe

### Auffällige Substanz:

**Massen 127, 109, 81, 155**

im Rhein bei Worms

Messwasserleitung 1 (linksrheinisch)

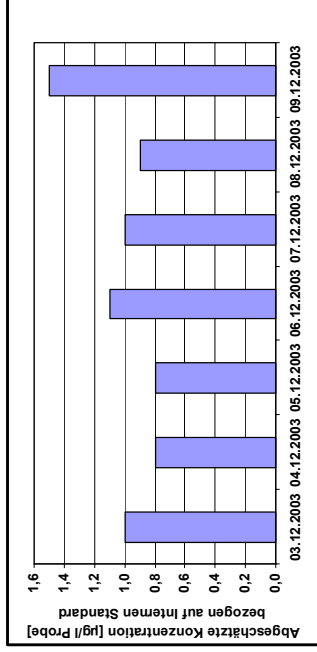
in der 24-h-Mischprobe vom 09.12.2003 6:00 Uhr MEZ  
bis 10.12.2003 6:00 Uhr MEZ

- Die Substanz wurde mit einem Standard abgesichert.
- Die Substanz wurde nicht mit einem Standard abgesichert.
- Es handelt sich um einen Vorschlag der NIST-Spektrenbibliothek.
- Die NIST-Spektrenbibliothek liefert keinen guten Vorschlag.

Ergebnisse der letzten Tage (MEZ):

Probe vom	Abschätzung der Konzentration über den Internen Standard [µg/l]
03.12.2003 6:00 Uhr - 04.12.2003 6:00 Uhr	1,0
04.12.2003 6:00 Uhr - 05.12.2003 6:00 Uhr	0,8
05.12.2003 6:00 Uhr - 06.12.2003 6:00 Uhr	0,8
06.12.2003 6:00 Uhr - 07.12.2003 6:00 Uhr	1,1
07.12.2003 6:00 Uhr - 08.12.2003 6:00 Uhr	1,0
08.12.2003 6:00 Uhr - 09.12.2003 6:00 Uhr	0,9
09.12.2003 6:00 Uhr - 10.12.2003 6:00 Uhr	1,5

Die Substanzkonzentration wurde nur über den Internen Standard abgeschätzt. Wiederfindungsraten und Responsefaktoren wurden nicht berücksichtigt.



Rheingütestation Worms

## GC/MS-Screening auf organische Spurenstoffe

### Auffällige Substanz:

**Massen 127, 109, 81, 155**

im Rhein bei Worms

Messwasserleitung 1 (linksrheinisch)

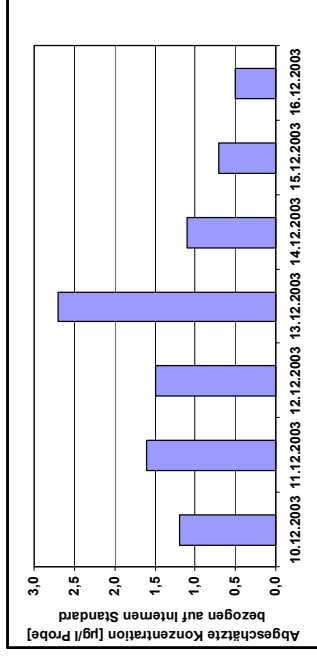
in der 24-h-Mischprobe vom 13.12.2003 6:00 Uhr MEZ  
bis 14.12.2003 6:00 Uhr MEZ

- Die Substanz wurde mit einem Standard abgesichert.
- Die Substanz wurde nicht mit einem Standard abgesichert.
- Es handelt sich um einen Vorschlag der NIST-Spektrenbibliothek.
- Die NIST-Spektrenbibliothek liefert keinen guten Vorschlag.

Ergebnisse der letzten Tage (MEZ):

Probe vom	Abschätzung der Konzentration über den Internen Standard [µg/l]
10.12.2003 6:00 Uhr - 11.12.2003 6:00 Uhr	1,2
11.12.2003 6:00 Uhr - 12.12.2003 6:00 Uhr	1,6
12.12.2003 6:00 Uhr - 13.12.2003 6:00 Uhr	1,5
13.12.2003 6:00 Uhr - 14.12.2003 6:00 Uhr	2,7
14.12.2003 6:00 Uhr - 15.12.2003 6:00 Uhr	1,1
15.12.2003 6:00 Uhr - 16.12.2003 6:00 Uhr	0,7
16.12.2003 6:00 Uhr - 17.12.2003 6:00 Uhr	0,5

Die Substanzkonzentration wurde nur über den Internen Standard abgeschätzt. Wiederfindungsraten und Responsefaktoren wurden nicht berücksichtigt.



Rheingütestation Worms

## GC/MS-Screening auf organische Spurenstoffe

### Auffällige Substanz:

Formylmethyl-  
triphenylphosphoran

im Rhein bei Worms

Messwasserleitung 1 (linksrheinisch)

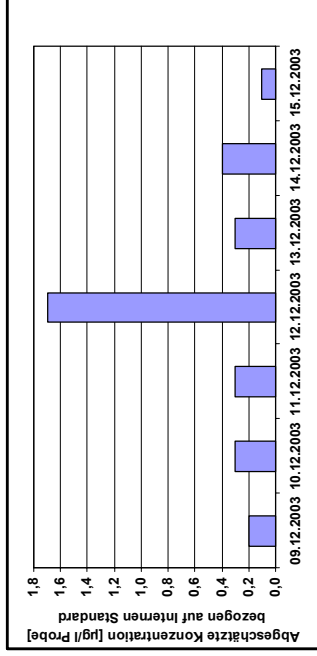
in der 24-h-Mischprobe vom 12.12.2003 6:00 Uhr MEZ  
bis 13.12.2003 6:00 Uhr MEZ

- Die Substanz wurde mit einem Standard abgesichert.
- Die Substanz wurde nicht mit einem Standard abgesichert.
- Es handelt sich um einen Vorschlag der NIST-Spektrenbibliothek.
- Die NIST-Spektrenbibliothek liefert keinen guten Vorschlag.

Ergebnisse der letzten Tage (MEZ):

Probe vom	Abschätzung der Konzentration über den Internen Standard [ $\mu\text{g/l}$ ]
09.12.2003 6:00 Uhr - 10.12.2003 6:00 Uhr	0,2
10.12.2003 6:00 Uhr - 11.12.2003 6:00 Uhr	0,3
11.12.2003 6:00 Uhr - 12.12.2003 6:00 Uhr	0,3
12.12.2003 6:00 Uhr - 13.12.2003 6:00 Uhr	1,7
13.12.2003 6:00 Uhr - 14.12.2003 6:00 Uhr	0,3
14.12.2003 6:00 Uhr - 15.12.2003 6:00 Uhr	0,4
15.12.2003 6:00 Uhr - 16.12.2003 6:00 Uhr	0,1

Die Substanzkonzentration wurde nur über den Internen Standard abgeschätzt. Wiederfindungsraten und Responsefaktoren wurden nicht berücksichtigt.





## **Anhang 2.2**

**Messwasserleitung 4**

**2003**



## Übersicht über die 2003 in der Messwasserleitung 4 detektierten Auffälligkeiten:

Monat	Probendatum	Detektierte Substanz	Über den internen Standard abgeschätztes Konzentrationsmaximum in µg/l (Probe)
<b>Januar</b>	14. – 24.1.2003	Triacetonamin	0,1
	14. – 31.1.2003	Surfynol E 102	0,1
<b>Februar</b>	4. – 28.2.2003	Surfynol E 102	0,2
	11. – 28.2.2003	Hexa(methoxymethyl)melamin	0,1
<b>März</b>	3. – 31.3.2003	Atrazin	<0,1
	18. – 31.3.2003	Surfynol E 102	0,2
<b>April</b>	1. – 30.4.2003	Chloroneb	<0,1
	1. – 30.4.2003	Hexa(methoxymethyl)melamin	0,1
	1. – 30.4.2003	Surfynol E102	0,3
	1. – 30.4.2003	Nicht identifizierbare Substanz mit den charakteristischen Massen 205,91,145	0,1
	1. – 30.4.2003	Atrazin	<0,1
	1. – 30.4.2003	Diazinon	<0,1
	1. – 30.4.2003	Nicht identifizierbare Substanz mit den charakteristischen Massen 111,343,155,91,68	0,1
	8. – 22.4.2003	Nicht identifizierbare Substanz mit den charakteristischen Massen 56,170,72,88,98,140,185	0,2
	8. – 22.4.2003	Nitrobenzol	0,1
	22. – 30.4.2003	Alachlor	<0,1
	22. – 30.4.2003	Metalaxyl	<0,1
22. – 30.4.2003	Ethofumesat	<0,1	

Monat	Probendatum	Detektierte Substanz	Über den internen Standard abgeschätztes Konzentrationsmaximum in µg/l (Probe)
	29. – 30.4.2003	Nicht identifizierbare Substanz mit den charakteristischen Massen 229,93,66,122,172	0,1
<b>Mai</b>	1. – 23.5.2003	Alachlor	<0,1
	1. – 23.5.2003	Nicht identifizierbare Substanz mit den charakteristischen Massen 111,343,155,91,68	0,1
	1. – 27.5.2003	Hexa(methoxymethyl)melamin	0,1
	1. – 31.5.2003	Nicht identifizierbare Substanz mit den charakteristischen Massen 205,91,145	0,1
	1. – 31.5.2003	Surfynol E102	0,2
	1. – 31.5.2003	Ethofumesate	<0,1
	1. – 31.5.2003	Atrazin	<0,1
	6. – 23.5.2003	Tinuvin P	0,1
<b>Juni</b>	1. – 30.6.2003	Atrazin	< 0,1
	1. – 30.6.2003	Surfynol	0,2
	3. – 17.6.2003	Terbutylazin	< 0,1
	6. – 24.6.2003	DEET	< 0,1
	6. – 24.6.2003	Nicht identifizierbare Substanz mit den charakteristischen Massen 56,170,72,88,98,140,185	0,4
	10. – 24.6.2003	2,5,5-Trimethyl-1,3-cyclohexandion	0,1
	27. – 1.7.2003	Propyphenazon	< 0,1
<b>Juli</b>	1. – 11.7.2003	Nicht identifizierbare Substanz mit den charakteristischen Massen 229,93,66,122,172	0,1
	1. – 11.7.2003	DEET	<0,1
	1. – 12.7.2003	Atrazin	<0,1



Monat	Probendatum	Detektierte Substanz	Über den internen Standard abgeschätztes Konzentrationsmaximum in µg/l (Probe)
	1. – 12.7.2003	Surfynol	0,1
	1. – 12.7.2003	Tris(2-chlorpropyl)phosphat	0,1
	4. – 11.7.2003	Propyphenazon	<0,1
	8. – 11.7.2003	Nicht identifizierbare Substanz mit den charakteristischen Massen 309,225,183,105	<0,1
	8. – 12.7.2003	Nicht identifizierbare Substanz mit den charakteristischen Massen 113,173,59	<0,1
	11. – 12.7.2003	Nicht identifizierbare Substanz mit den charakteristischen Massen 58,98,112,114,71,156	<0,1
	11. – 12.7.2003	Triacetonamin	<0,1
<b>August</b>	6. – 15.8.2003	Triacetonamin	0,1
	6. – 31.8.2003	Nicht identifizierbare Substanz mit den charakteristischen Massen 205,91,145	0,1
	6. – 31.8.2003	Triphenylphosphat	0,4
	6. – 31.8.2003	Surfynol	0,2
	8. – 12.8.2003	2,5,5-Trimethyl-1,3-cyclohexandion	0,1
	15. – 19.8.2003	Indol	<0,1
	19. – 31.8.2003	Nicht identifizierbare Substanz mit den charakteristischen Massen 341,359,208,236	0,3
	19. – 31.8.2003	Tris(2-chlorpropyl)phosphat	0,1
	19. – 31.8.2003	DEET	0,1
	19. – 31.8.2003		0,2
<b>September</b>	2. – 12.9.2003	Nicht identifizierbare Substanz mit den charakteristischen Massen 113,173,59	0,1

Monat	Probendatum	Detektierte Substanz	Über den internen Standard abgeschätztes Konzentrationsmaximum in µg/l (Probe)
	2. – 21.9.2003	Nicht identifizierbare Substanz mit den charakteristischen Massen 341,359,208,236,193	0,2
	2. – 23.9.2003	Tris(2-chlorpropyl)phosphat	0,1
	2. – 30.9.2003	Nicht identifizierbare Substanz mit den charakteristischen Massen 205,91,145	0,1
	2. – 30.9.2003	Surfynol	0,5
	12. – 16.9.2003	Trimethylbenzole	<0,1
	12. – 17.9.2003	Nicht identifizierbare Substanz mit den charakteristischen Massen 229,93,145	0,6
	16. – 23.9.2003	Nicht identifizierbare Substanz mit den charakteristischen Massen 111,343,155,91	<0,1
	17. – 23.9.2003	Nicht identifizierbare Substanz mit den charakteristischen Massen 168,84,126,42	0,1
	17. – 23.9.2003	Propyphenazon (Schmerzmittel)	<0,1
	17. – 30.9.2003	Diazepam (Valium)	<0,1
	26. – 30.9.2003	Nicht identifizierbare Substanz mit den charakteristischen Massen 166,151,123,138,95,180,220	<0,1
<b>Oktober</b>	1. – 10.10.2003	Nicht identifizierbare Substanz mit den charakteristischen Massen 113,173,59	<b>1,0</b>
	2. – 17.10.2003	2,5,5-Trimethyl-1,3-cyclohexandion	0,2
	2. – 31.10.2003	Surfynol	0,5
	2. – 31.10.2003	Nicht identifizierbare Substanz mit den charakteristischen Massen 205,91,145	0,2
	7. – 31.10.2003	Triacetonamin	<0,1

Monat	Probendatum	Detektierte Substanz	Über den internen Standard abgeschätztes Konzentrationsmaximum in µg/l (Probe)
	10. – 31.10.2003	Hexa(methoxymethyl)melamin	0,2
	21. – 24.10.2003	2,5,5-Trimethyl-1,3-cyclohexandion	0,7
	21. – 24.10.2003	Nicht identifizierbare Substanz mit den charakteristischen Massen 56,170,72,88	0,3
	21. – 31.10.2003	Tris(2-chlorpropyl)phosphat	0,2
<b>November</b>	1. – 30.11.2003	Surfynol	0,4
	1. – 30.11.2003	Nicht identifizierbare Substanz mit den charakteristischen Massen 205,91,145	0,4
	4. – 30.11.2003	Carbamazepin	0,2
	18. – 30.11.2003	Nicht identifizierbare Substanz mit den charakteristischen Massen 113,173,59	0,2
	28. – 30.11.2003	Dipropyladipinsäureester	0,2
<b>Dezember</b>	2. – 5.12.2003	Nicht identifizierbare Substanz mit den charakteristischen Massen 205,91,145	0,5
	2. – 31.12.2003	Surfynol	0,3
	9. – 18.12.2003	Nicht identifizierbare Substanz mit den charakteristischen Massen 168,126,109,83	0,3
	12. –16.12.2003	Nicht identifizierbare Substanz mit den charakteristischen Massen 113,173,59	0,5
	23. – 31.12.2003	Nicht identifizierbare Substanz mit den charakteristischen Massen 56,170,72,88	0,4
	23. – 31.12.2003	2,5,5-Trimethyl-1,3-cyclohexandion	0,7
	30. – 31.12.2003	Triacetonamin	0,3



## Stoffliste der 2003 an der Messstelle 4 detektierten Substanzen

## Mit Standards abgesichert identifiziert:

Alachlor  
Atrazin  
Benzophenon  
Carbamazepin  
Chloranilin  
DEET (N,N-Diethyl-m-toluamid)  
Diazinon  
Dibenzofuran  
2,6-Di-tertiär-butyl-p-benzochinon  
Dichloraniline  
1,2-Diethylbenzol  
Diethylphthalat  
Di-tertiär-butylphenol  
Di-tertiär-butylbenzol  
Ethofumesate  
Galaxolid (HHCB)  
2-(Methylthio)-benzothiazol  
N,N-Diethyl-toluidin  
N-Butylbenzolsulfonamid  
4-Nitroanilin  
Nitrobenzol  
N-Methyl-N-phenyl-acetamid  
Surfynol E102  
Terbuthylazin  
Tetramethylbenzole  
Tonalid  
Tributylphosphat  
Trimethylbenzole  
Triphenylphosphinsulfid  
Tris-(2-chlorethyl)-phosphat

## Vorschläge der NIST-Spektrenbibliothek:

Acetochlor  
3-(Acetyloxy)-17-hydroxy,(3 $\alpha$ )-pregn-5en-20-on  
2,6-Tertiär-Butyl-4-nitrophenol  
Carbamazepin-Metabolit  
Caren  
Chloroneb  
1-Chlor-4-(methylsulfonyl)-benzol  
Diazepam (Valium)  
2,3-Dimethylchinoxalin  
Dipropyladipinsäureester  
2,6-Di-tertiär-butyl-a-(dimethylamino)-p-cresol  
3-Ethyl-3-hydroxy-5.(alpha.)-androstan-17-on  
Formylmethylen-triphenylphosphoran  
1,2,3,4,5,6-Hexahydro-1,1,5,5-tetramethyl-7H-  
2,4a-methanonaphthalen-7-on  
Hexa(methoxymethyl)melamin  
Artefact von Hexa(methoxymethyl)melamin  
Indol  
Kohlenwasserstoffe  
7-Methoxy-2H-1-Benzopyran-2-on  
2-Methoxy-4-methyl-10H-acridin-9-on  
N-Acetyl-4-cyano-phenylethan-amin  
N-Ethyl-toluolsulfonamid  
N-Formylindolin  
4b,5,6,7,8,8a,9,10-Octahydro-4b,8-dimethyl-2-  
isopropylphenanthren  
Prednisolon  
Propyphenazon (Schmerzmittel)  
(3 $\alpha$ ,5 $\alpha$ )-Stigmastan-3-ol-5-chloracetat  
2,3,5,6-Tetrahydro-3,3,4,5,5,8-hexamethyl-S-  
Indacen-1,7-dion  
2,5,5,8a-Tetramethyl-3-oxo-3,4,4a,5,6,7,8,8a-  
octahydronaphthalen-1-carboxylsäuremethylester  
Tinuvin P (Drometrisol)  
p-Tolylmethylsulfon  
Triacetonamin  
Triallyl-1,3,5-triazin-2,4,6-(1H,3H,5H)-trion  
Triethylcitrat  
2,4,6-Trimethylpropiophenon  
Triphenylphosphat  
Tris-(2-chlorpropyl)phosphat

**Nicht identifizierte Substanzen:**

Die Benennung erfolgte nach ihren charakteristischen Massen

103,132,176,77,162,102,131,51,148	206,153,221,91 überlagert
105,77,247,188	211,147,244,127,167
105,77,61,136,92 Methylbenzoat?	216,177,150,243,91,258 überlagert mit Tonalid
107,109,91,122,67,41,135,206	219,191,234,173,249,251
109,147,175,218,253,255,243,162,127,91,190,202,77 überlagert	222,251,208,236
109,163,67,124	227,242,143,128
111,129,83,101 Adipinsäureester?	226,98,129?,42,58,69,83
111,343,91,68,155	229,120,91,147,201,129,161
114,129,83,175,70,55,43	229,93,66
114,185,157,84,213 überlagert	232,189,133,217,147,175,105,91
119,189,91,109,133,81,161	233,174,135,119,180,203,91 ueberl.
123,151,95,166,138,109,180,222,109,67	233,205,191,175,109,121,148
123,95,43,67,55	233,91,77,105
124,43,139,197	236,272,91,147,185,229
129,111,147	237,252,42
131,149,91,119,161,232,243,258	239,205,241,240,242,91,129
131,105,145	244,195,279,224,260
132,145,159,131,188	245,200,172,66 + 93,229
132,150,262	250,235,179,145,91
133,168,63,43	253,238,182,196,168
134,106,79,91	255,27
144,186,229,80,127	256,258,260,221,148
145,160,202,91,117,168	254,161,256,163,176,178,224
146,115,117,91,129,172	257,201,239,272
146,128,161	268,270,161,163,176,178,224,379,381
147,146	272,301,228,198,91,121 + 338,282,257
147,146,111,203,71,100,87,182	303,347,252,91
150,122,91,206,43	304,302,306,255,,91,147,232 mit 3 Chlor
154,182,139,140,43,167,112,68,79	309,225,183,105,77
154,203,230	327,359,297,163
157,113,57,59,68,85,189,41	338,282,323,173,360
158,143	341,359,208
160,175,132,117	353,368
162,133,207	368,353,277,118
162,238	381,383,379,385,321,269,191,99 mit 3 Chlor
165,137,180,205,221,109,91	41,43,71,89,143,173
165,166,167,164,163 2-Ring-System?	41,57,71,69,67,83
167,210,67,92,149,83,98,111,121	43,126,168,55,109
168,167,121,93,67,112	43,44,61,55,70
168,41,43,57,55,71,69,84,124	43,82,97
168,84,42,126	44,144
170,241,226,135,185,205,150 überlagert	56,72,99,88,170
175,202,259,106,127,57 überlagert	67,69,97,83,55,57,111,125,41
176,274,201,91,121	68,43,83,107
179,123,138,194	69,112,114,125,97,83,41,154
180,165,135,119,91	75,187,261,47
180,177,140,137,107,91,79,56	82,97
182,82,76,114,56,67	83,220,138
182,56,69,140	85,73,157,127,120
187,145,119,91,205,107,161	88,135
191,206,100,163,57,58,107,135	91,93,79,67,107,117,134,281
191,234,121,95,79,67,234	93,91,77,79,135,107,121
192,163,207	95,107,121,177,83,67,149,192
193,250,91	97,111,69,83,41,139,125,179,201,277
197,105,77,200	98,100,112,67,84,126,168
205,206,145,119,161	98,112,114,115,71,58,156,171

**Konzentrationsverläufe der Auffälligkeiten MWL 4 2003**





## GC/MS-Screening auf organische Spurenstoffe

### Auffällige Substanz:

**Charakteristische Massen  
113,173,59**

im Rhein bei Worms

Messwasserleitung 4 (rechtsrheinisch)

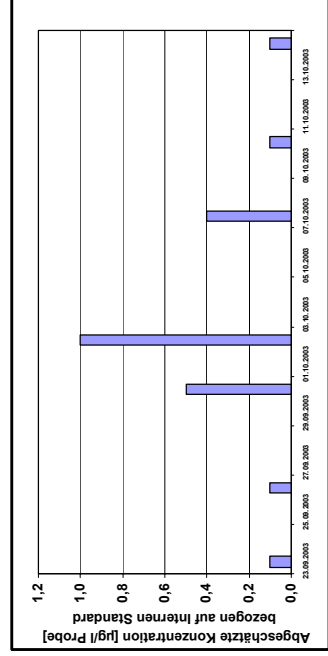
in der 120-h-Mischprobe von 02.10.2003 8:00 Uhr MEZ  
bis 07.10.2003 8:00 Uhr MEZ

- Die Substanz wurde mit einem Standard abgesichert.
- Die Substanz wurde nicht mit einem Standard abgesichert.
- Es handelt sich um einen Vorschlag der NIST-Spektrenbibliothek.
- Die NIST-Spektrenbibliothek liefert keinen guten Vorschlag.

Ergebnisse der letzten Tage (MEZ):

Probe vom	Abschätzung der Konzentration über den Internen Standard [ $\mu\text{g/l}$ ]
23.09.2003 8:00 Uhr - 26.09.2003 8:00 Uhr	0,1
26.09.2003 8:00 Uhr - 30.09.2003 8:00 Uhr	0,1
30.09.2003 8:00 Uhr - 02.10.2003 8:00 Uhr	0,5
02.10.2003 8:00 Uhr - 07.10.2003 8:00 Uhr	1,0
07.10.2003 8:00 Uhr - 10.10.2003 8:00 Uhr	0,4
10.10.2003 8:00 Uhr - 14.10.2003 8:00 Uhr	0,1
14.10.2003 8:00 Uhr - 17.10.2003 8:00 Uhr	0,1

Die Substanzkonzentration wurde nur über den Internen Standard abgeschätzt.  
Wiederfindungsraten und Responsefaktoren wurden nicht berücksichtigt.



Rheingütestation Worms



## **Anhang 3.1**

### **Auftreten von Substanzen 1997 - 2003**

<b>Wiederholtes Auftreten von Substanzen im GC/MS-Screening an Messwasserleitung 1</b>							
<b>Identifizierte Substanzen</b>							
<b>Substanz</b>	<b>1997</b>	<b>1998</b>	<b>1999</b>	<b>2000</b>	<b>2001</b>	<b>2002</b>	<b>2003</b>
1,2-Dichlorbenzol	1997	1998	1999	2000		2002	
1,3-Dichlorbenzol	1997						
1,8-Naphthalimid	1997	1998	1999	2000	2001	2002	2003
1-Chlor-2,4-dinitrobenzol	1997						
2-(Methylthio)-benzothiazol	1997	1998	1999	2000	2001	2002	2003
2,3,3-Trimethyl-3H-indol	1997	1998	1999	2000	2001	2002	
2,4,6-Trimethylacetophenon	1997						
2,4-Dimethylacetophenon	1997						
2,6-Dichlorphenol	1997						
2,6-Di-iso-propylanilin			1999	2000	2001		
Dimethylaniline (Xylidine)	1997	1998	1999	2000	2001	2002	2003
2,6-Dimethylphenol	1997					2002	
2,6-Di-tert.-butyl-p-benzochinon	1997						
2-Brom-6-methoxy-naphthalin	1997						
2-Chlor-2',6'-acetoxylidin	1997		1999	2000	2001		
2-Chlor-4-nitroanilin	1997						
2-Chlor-5-(trifluormethyl)-anilin	1997						
2-Nitro-m-xylol	1997						
2-Nitrotoluol	1997						
3,3'-Sulfonyl-bis-anilin			1999	2000			
3',4'-Dimethylacetophenon	1997						
3?,5?-Di-tertiär-butylphenol						2002	
3-Chlor-2,6-diethylanilin	1997						
3-tertiär-Butylphenol	1997						
4-Methylanisol	1997						
4-tert.-Butylbenzylmethylether		1998	1999	2000	2001		
4-tert.-Butylcyclohexanon	1997						
4-tert.-Butyl-o-xylol	1997						
4-tertiär-Butyltoluol	1997						
Alachlor					2001	2002	2003
Anilin	1997						
Anthrachinon	1997		1999				
Anthranilsäureisopropylamid (AIPA)	1997		1999	2000	2001	2002	2003
Atrazin				2000	2001	2002	2003
Benzanthron	1997		1999	2000	2001	2002	
Benzophenon			1999	2000	2001	2002	2003
Benzylbutylphthalat	1997						
Bis-(4-Chlorphenyl)-sulfon	1997						
Caffein	1997						
Carbamazepin	1997		1999	2000	2001	2002	2003
Celestolide (ADBI)	1997						
Chinaldin	1997	1998	1999	2000	2001		2003
Chinolin	1997						
Cumarin 1	1997			2000	2001		
Cumarin 2	1997			2000			
DEET (N,N-Diethyltoluamid)	1997				2001		2003
Diazinon							2003
Dichloraniline	1997		1999	2000	2001	2002	2003
Diethylbenzole							2003

<b>Wiederholtes Auftreten von Substanzen im GC/MS-Screening an Messwasserleitung 1</b>							
<b>Identifizierte Substanzen</b>							
<b>Substanz</b>	<b>1997</b>	<b>1998</b>	<b>1999</b>	<b>2000</b>	<b>2001</b>	<b>2002</b>	<b>2003</b>
Diethylphthalat			1999	2000		2002	
Dimethylchinolin	1997		1999				
Dimethylphthalat			1999	2000		2002	
Diphenylether	1997	1998	1999	2000		2002	
Diphenylphosphinsäureethylester	1997		1999	2000	2001	2002	2003
Di-tertiär-butylbenzol						2002	
Ethofumesate	1997				2001	2002	2003
Galaxolid	1997		1999	2000	2001	2002	2003
Iso-Chloridazon	1997	1998					
Isophoron	1997		1999	2000			
Isophoronnitril			1999	2000	2001	2002	2003
Metalaxyl							2003
Metazachlor					2001	2002	2003
Methylanisol		1998	1999	2000			
Metolachlor				2000	2001	2002	
Michlers Keton	1997						
m-Phenetidin	1997						
N-(2-Chloracetyl)-2,6-dimethylanilin					2002	2003	
N,N-Dibutylformamid	1997						
N,N-Dicyclohexylharnstoff	1997						
N,N-Diethylanilin	1997	1998	1999	2000	2001	2002	
N,N-Diethyltoluidin	1997			2000	2001		2003
N,N-Dimethylanilin	1997	1998	1999	2000	2001		
N,N-Dimethylbenzamid	1997	1998	1999	2000		2002	2003
N-Benzyl-N-ethylanilin	1997						
N-Butylbenzolsulfonamid	1997		1999	2000	2001	2002	2003
N-Cyclohexyl-2-pyrrolidon	1997			2000			
N-Ethylanilin	1997	1998	1999	2000	2001		
N-Ethyltoluidin	1997	1998	1999	2000	2001		
Nitrobenzol	1997		1999				
N-Methylanilin			1999	2000			
p-Nitroanilin	1997						
Resorcindimethylether	1997						
Simazin	1997						
Surfynol E102	1997		1999	2000	2001	2002	2003
Swep	1997		1999	2000	2001	2002	2003
Terbutylazin	1997				2001		
Terbutryn	1997						
Tetrabutylharnstoff			1999	2000	2001	2002	2003
Tetramethylbenzole	1997						2003
Toluidin	1997		1999	2000	2001	2002	2003
Tonalide (AHTN)	1997				2001	2002	2003
Tributylphosphat	1997		1999	2000	2001		2003
Trichloranilin	1997		1999				
Trimethylbenzole	1997		1999			2002	2003
Triphenylphosphinsulfid	1997		1999	2000	2001	2002	2003
Tris-(2-chlorethyl)-phosphat	1997		1999	2000	2001	2002	2003
Vinclozolin			1999		2001	2002	2003

**Wiederholtes Auftreten von Substanzen  
im GC/MS-Screening an Messwasserleitung 1**

**Substanzen aus guten Bibliotheksvorschlägen**

Substanz	1997	1998	1999	2000	2001	2002	2003
(3.β.)-Cholesta-4,6-dien-3-ol					2001		
(3β,5α)-Stigmastan-3-ol-5-chloracetat				2000			2003
(5.β.)-Androstan-3,17-dion							
(N-2,6-Dimethylphenyl)-N-(methoxyacetyl)-DL-alanin-methylester?	1997						
1-(1-Cyclohexen-1-yl)-4-methoxy-benzol					2001		
1-(2,4-Dimethylphenyl)-1-propanon							2003
1-(2,6-Dichlorphenyl)-1,3-dihydro-2H-indol-2-on					2001		
1,1,3,3-Tetraethylharnstoff	1997						
1,10-Phenanthrolin	1997						
1,2,3,4,5,6,7,8-Octahydro-acridin	1997						2003
1,2,3,4-Tetrahydro-8-hydroxy-4-oxo-l-chinaldinsäure	1997						
1,3,5-Estratrien-3,11,b,17,b-triol				2000	2001		
1,3-Diphenyl-1-triazene	1997						
1,3-Di-tert.-butylbenzol	1997						
1,4-Diaminoanthrachinon	1997						
1,4-Diethylbenzol	1997						
1-Amino-5-chlor-anthrachinon				2000	2001		2003
1-Chlor-4-(methylsulfonyl)-benzol					2001	2002	2003
1-Chlor-4-methylanthrachinon			1999				
1-Phenyl-2,4-hexadien-1-on	1997						
1-Phenyl-2-methyl-6,7-dimethoxy-1,2,3,4-tetrahydroisochinolin			1999			2002	
2-(1S-Methyl-2S-ethyl-4-hydroxybutyl)-1,3-dithian						2002	
2-(4-Pyridyl)-1H-pyrrol[2,3-b]pyridin							2003
2-(Methoxyethoxy)ethyl-4-aminobenzoessäure				2000			
2-(Trifluormethyl)-anilin	1997		1999				
2,3,5,6-Tetrahydro-3,3,4,5,5,8-hexamethyl-S-Indacen-1,7-dion							2003
2,3-Dihydro-1,2,3,3-tetramethyl-1H-indol				2000			
2,4,6-Tribromanilin			1999				
2,4,6-Trichloranilin						2002	
2,4,6-Trimethylbenzoessäuremethylester				2000		2002	
2,4,6-Trimethylbenzonnitril	1997					2002	
2,4,6-Trimethylpropiophenon							2003
2,4,6-Trimethylpyridin		1998	1999				
2,4-Dimethyl-6-tertiär-butylphenol						2002	
2,5,6-Trimethylcyclohexenon			1999				
2,6-Diisopropyl-anilin						2002	
2,6-Di-tertiär-butyl-p-benzochinon						2002	
2,6-Di-tert.-Butyl-2,5-cyclohexadien					2001		
2,6-Di-tert.-Butyl-2,5-cyclohexadien-1,4-dion					2001		
2-Chlor-N-(2,6-dimethylphenyl)-N-(1H-pyrazol-1-ylmethyl)-acetamid					2001		
Acetochlor = 2-Chlor-N-(ethoxymethyl)-N-(2-ethyl-6-methylphenyl)-acetamid						2002	2003
2-Methoxyanilin-5-sulfonsäurediethylamid			1999				
2-Methyl-1H-isoindol-1,3(2H)-dion =N-Methylphthalimid				2000	2001	2002	2003
2-Methylindolin					2001	2002	2003
2-tertiär-Butylanilin							2003
3-(2-Methylphenyl)propionsäure						2002	
3,3,4-Trimethyl-4-(4-methylphenyl)-cyclopentanon						2002	2003

**Wiederholtes Auftreten von Substanzen  
im GC/MS-Screening an Messwasserleitung 1**

**Substanzen aus guten Bibliotheksvorschlägen**

Substanz	1997	1998	1999	2000	2001	2002	2003
3,3-Dimethyl-6-methylcyclohexen				2000			
3,3-Dimethyl-2-(3-methyl-1,3-butadienyl)-cyclopentanon							2003
3,4-Dimethoxy-a-iso-propylacetoneitrilbenzol			1999				
3,4-Dihydro-3,5,8-trimethyl-1(2H)-naphthalinon						2002	2003
3,4-Dimethylbenzamid				2000			
3,4-Dimethylthiophen						2002	
3-Chlorcyclohexen	1997						
3-Ethenyl-2,2-dimethyl-cyclopropanocarboxylsäureethylester							2003
3-Ethyl-3-hydroxy-5.(alpha.)-androstan-17-on							2003
3-Methoxy-2,3-dimethyl-3H-indol	1997						
3-Methoxy-2,4(1H,3H)-chinazolindion				2000			
3-Methoxy-4,7-dimethyl-1H-isochinolin				2000	2001		
4-(4-Methylphenylamino)-Pyrimidin-2(1H)-on							2003
4-(Diethylamino)-benzotrinitril						2002	
4,4'-Bis(dipropylamin)biphenyl					2001		
4,4'-Methylen bis [2-methylanilin			1999	2000			
4,4'-Methylen-bis-[N,N-dimethylanilin	1997						
4,5-Dihydro-5,5,7-trimethyl-6H-[1,2,5]oxadiazol[3,4-b][1,4]diazepin						2002	2003
4-Amino-3,5-dichlor-benzotrinitril				2000	2001		
4b,5,6,7,8,8a,9,10-Octahydro-4b,8-dimethyl-2-isopropylphenanthren					2001	2002	
4-Chlor-3-(trifluormethyl)anilin			1999				
4-Chlor-N,N-diethylanilin			1999		2001		
4-Cyano-2,6-dichlor-3-methylpyridin				2000			
4-Cyclodecyl-2,6-dimethylmorpholinacetat					2001		
4-Hydroxy-9-fluorenol od. Xanthon	1997						
4-Methylbenzolsulfonamid			1999	2000	2001		2003
4-sec-Butyl-acridon						2002	2003
5,6-Dimethyl-1,3-isobenzofurandion					2001		
5-Phenyl-3-piperidino-4-penten-1-ol							2003
6-(1-Ethylpropyl)-1,2,3,4-tetrahydronaphthalin			1999	2000	2001	2002	2003
6-Ethoxy-1,2-dihydro-2,2,4-trimethylchinolin			1999				
6-Methoxy-1,2-dimethyl-beta-carbolin	1997						
6-tert.-Butyl-2,4-dimethylphenol	1997						
7-Methoxy-2H-1-benzopyran-2-on							2003
8-Amino-4-methylchinolin			1999	2000			
9,10-Dihydro-1-chlor-4-methyl-9,10-anthrachinon					2001	2002	
9H-Fluoren-9-on od. Phenanthrendion	1997						
Abbau-/Nebenprodukt von 2-Methylen-1,3,3-trimethylindolin	1997						
Acenaphthen	1997						
Acenaphthenchinon	1997						
Aminoanthrachinon	1997						
Benzphetamin	1997						
Bis[4-(dimethylamino)phenyl]methanon		1998					
Bis-iso-propyl-1,1'biphenyl						2002	
b-Phenylbenzolpropannitril			1999				
Butylat-hydroxy-toluol				2000			
C15.H22.O2					2001		
Carbamazepinmetabolit						2002	
Carbofuran						2002	

**Wiederholtes Auftreten von Substanzen  
im GC/MS-Screening an Messwasserleitung 1**

**Substanzen aus guten Bibliotheksvorschlägen**

Substanz	1997	1998	1999	2000	2001	2002	2003
Caren							2003
Cholesta-3,5-dien-7-on					2001		
Chloracetophenon			1999				
Chlor-N,N-dimethylanilin			1999				
Cholestadien				2000	2001		
Clomazon = Dimethazon					2001		
Cyclopropylbenzole			1999				
Delorazepam	1997						
Diazepam (Valium)							2003
Dibenzofuran						2002	
Diclofenac			1999				
Dicyclohexylamin		1998					
Diethylanilin						2002	
Difluoranilin			1999				
Di-iso-octyladipinsäureester					2001		
Di-iso-propyl-4-methoxymethylbenzol						2002	
Di-iso-propyladipinsäureester		1998	1999	2000	2001		2003
Diisopropyl-naphthalin				2000			
Dimethoxy-benzolacetonitril	1997						
Dimethyl-3(2H)-benzofuranon	1997						
Dimethylnaphthalin				2000			
Diphenylsulfon						2002	2003
Equilin							2003
Ethenyl-methylbenzole Ethyldiphenylphosphinoxid			1999				
Formylmethylen-triphenylphosphoran	1997		1999	2000	2001	2002	
Gallopamil					2001		
Halazepam					2001		
Hexa-(methoxymethyl)-melamin			1999	2000	2001	2002	2003
Hexacosan	1997						
Iminostilben (Abbauprodukt Carbamezepin)					2001		2003
Indol				2000	2002		
Kohlenwasserstoffe			1999	2000	2001	2002	2003
Kresol				2000			
Lactone (4 verschiedene)	1997		1999	2000	2001	2002	2003
Methansulfanid				2000	2001	2002	2003
Methoxyessigsäure-N-phenylethylamid (MEPEA)		1998					
Methyl-1H-indol				2000	2001		
Methylnaphthalin				2000			
Methylphenylsulfon			1999	2000	2001	2002	2003
Methylpropynylbenzol			1999				
Mono-iso-octyladipinsäureester					2001		
N-(1-Formylethyl)-phthalimid				2000			
N-(1-Methylethyl)-N'-phenyl-1,4-benzoldiamin					2001	2002	
N-(2,6-Di-iso-propylphenyl)-methylcarbammat						2002	
N-(2-Chloroacetyl)-2,6-dimethylanilin			1999				
N-(2-Formylphenyl)-N-methylformamid				2000			
N-(3-Methylphenyl)-2,4-dinitroanilin			1999				
N,N,2-Trimethylanilin			1999				
N-[1-(1-naphthalenyl)ethyl]-acetamid						2002	2003
N-4-Methyl-N-phenylacetamid					2001		
N-Acetyl-2-deut.-DL-glutaminsäuredimethylester ???			1999				
N-Acetyl-4-cyano-phenylethan-amin						2002	
N-Allyl-4-Morpholin-1,8-naphthalimid					2001		



**Wiederholtes Auftreten von Substanzen  
im GC/MS-Screening an Messwasserleitung 1**

**Substanzen aus guten Bibliotheksvorschlägen**

Substanz	1997	1998	1999	2000	2001	2002	2003
N-Ethyl-N-phenylformamid					2001		2003
N-Methyl-1-phenylcyclohexylamin			1999	2000	2001		
N-Methyl-N-phenyl-acetamid							2003
N-Phenyl-2-naphthalinamin				2000	2001		
o- od. p-Phenetidin	1997						
Octadecensäuremethylester							2003
Octamethyl-1,4-cyclohexadien		1998	1999				
Oxadiazon					2001		
Perinaphtenon	1997						
Phenanthren				2000		2002	
Phenazin	1997		1999				
Phenobarbital MTB1						2002	
Phenylcyclohexen?	1997						
Phenyl-diethyl-phosphorsäureester							2003
Phthalyl-b-alanin			1999				
Pregnonolacetat							2003
Propenylbenzol			1999				
Propylanilin				2000			
Propyzamid						2002	
p-Toluolsulfonamid		1998					
p-Tolylmethylsulfon							2003
sek.-Butyl-ethylbenzol	1997						
Sitosterolacetat				2000			
Styrol	1997						
tertiär-Butylphenol			1999	2000	2001		
Tertiär-Butylphenylether							2003
Tetrabromethen			1999				
Tetraethylharnstoff							2003
Tetra-iso-butylphosphat			1999				
trans-Zimtsäuremethylester			1999				
Triallyl-1,3,5-triazin-2,4,6-(1H,3H,5H)-trion						2002	2003
Triethylcitrat							2003
Triethylphosphorthioat				2000			
Trimethylphenol				2000			
Triphenylphosphat	1997		1999				
Triphenylphosphin							2003
Tris(2-Chlorpropyl)phosphat				2000	2001	2002	2003
Verapamil			1999				
Vitamin E acetat						2002	
6-tertiär-Butyl-o-kresol							2002
N-(2,6-Dimethylphenyl)-N-(methyl-1-pyrazol)-1-pyrazolesigsäureamid						2001	2002
Hydrodehydrolinalool							

**Wiederholtes Auftreten von Substanzen  
im GC/MS-Screening an Messwasserleitung 1**

**Nicht identifizierte Substanzen**

Charakteristische Massen der Substanz	1997	1998	1999	2000	2001	2002	2003
44,144						2002	2003
67,95						2002	2003
73,277						2002	
82,97					2001	2002	
97,69	1997						
104,78	1997			2000	2001	2002	2003
133,105	1997						
147,146							2003
154,205						2002	
163,178	1997						
167,152					2001	2002	2003
186,118	1997						
192,111	1997						
199,198	1997						
264	1997						
85.56.113.67.98		1998					
96.139.111.82.68.56		1998					
100.58.86	1997					2002	
100.72.82.67							2003
100.98.70.113.130.56							2003
103.132.176.77.162.102.131.51.148						2002	
103.59.41.87							2003
104.157.130	1997					2002	2003
105.118.117.77	1997					2002	2003
106.107.151.193.134					2001	2002	2003
106.121.149.77.79.93...	1997						
106.135.163							2003
107.109.121.67.91.95.139.79.193.208						2002	2003
107.150.95.79.67.135.194						2002	2003
111.110.69.95.85.55.151.192.233	1997						
111.129.83.101						2002	
111.192.79.67.55					2001		2003
114.185.157.84.213						2002	
117.116.89.90.253.97	1997			2000	2001		2003
118.132.91.77.57	1997						
118.133.178.106.91	1997		1999		2001		
119.105.134.91.77.55	1997						2003
119.234.308.193	1997			2000	2001		
119.91.175.63							2003
120.121.164.163.92.170 ueberl.	1997						
120.136.132.92.194							2003
120.155.91.77	1997						
122.109.145.200.230.79.41						2002	2003
122.150.107.79.59.152							2003
123.137.138.136.125.121.150.69.91.180.209.300					2001		
123.151.95.166.138.109.180.222.109.67					2001	2002	2003
124.139.199.41.185				2000	2001	2002	2003
125.196.153.139.55.79.91					2001		2003
125.201.99.203					2001		
128.213.184.185.157			1999	2000	2001	2002	
129.111.147 Adipinsäureester						2002	2003
129.156.210 (5 verschiedene Nitrile)	1997		1999	2000	2001	2002	2003
131.178.191.205.264						2002	

**Wiederholtes Auftreten von Substanzen  
im GC/MS-Screening an Messwasserleitung 1**

**Nicht identifizierte Substanzen**

Charakteristische Massen der Substanz	1997	1998	1999	2000	2001	2002	2003
132.117.91.257						2002	2003
132.143.150.117.107.115.91.79.169	1997					2002	2003
132.150.262						2002	2003
134.213.106.91.79.65				2000			
134.105.190.227	1997						
134.118.221.78.91.51.345							2003
134.201.91						2002	
135.134.107.106.150.149.77				2000			
135.153.107.93.162.177.79							2003
135.94.166							2003
135.95.150						2002	2003
139.210.245.240.86	1997						
139.55.67.69.85				2000			
139.95.43.121.123.125 (3x Cl)					2001		
140.196.83.167			1999	2000	2001		
140.83.196.69.167			1999	2000	2001	2002	2003
141.162.123.81.55					2001	2002	
141.169.57.85.170				2000	2001	2002	2003
141.171.86.95.79.111							2003
141.81.123.55	1997						
141.95.67.41.125						2002	
142.141.115						2002	2003
143.115.171							2003
146.128.161					2001	2002	2003
146.91.77.117.160.50	1997					2002	2003
147.119.91.77							2003
148.259.261.216.370	1997						
150.165.135	1997						
150.165.157.120	1997						
151.135.108.91.77	1997				2001	2002	
151.167.179						2002	
152.180.113							2003
152.236.137.91.67							2003
152.95.81.123.110.....	1997						
153.152.151.150.109						2002	2003
153.196.181	1997				2001		2003
154.153.152.155.151 2-Ring-System						2002	
154.203.205.230.232					2001	2002	
155.84.112.137							2003
155.84.112.241.197.209.225.256	1997		1999	2000	2001	2002	2003
156.241.128.57.100.86.284	1997						
158.159.141.94.105.186.214	1997						
158.185.200.130	1999						
159.286.288.257						2002	2003
159.67.144.82.166..+ 2-Chlornitrobenzol	1997						
160.175.132.117					2001	2002	2003
161.105.193.178.146.118.79.77	1997		1999	2000			
161.163.176.178.153	1997			2000	2001	2002	2003
161.189.133.71.57.106.120.147.175						2002	
162.119.146.204.92.189		1998	1999	2000	2001	2002	
162.163.95.147.79							2003
162.164.179.207.133	1997						
162.177.118.91	1997						

**Wiederholtes Auftreten von Substanzen  
im GC/MS-Screening an Messwasserleitung 1**

**Nicht identifizierte Substanzen**

Charakteristische Massen der Substanz	1997	1998	1999	2000	2001	2002	2003
162.204.146.119	1997						
164.179.136.108.150	1997						
165.137.180.205.221.109.91						2002	2003
165.166.167.164.163 2-Ring-System						2002	
165.180.137.205.221.193.91				2000	2001		
166.110.91.79.93							2003
167.151.152.179.194	1997						
167.166.165.95.67				2000			
167.210.67.92.149.83.98.111.121					2001		2003
167.241.199	1997						
168.109.67.93.205							2003
168.167.121.93.67.112						2002	2003
168.170.140.183.77	1997						
171.200.172.158.144	1997				2001		
173.160.133						2002	
173.175.129						2002	
176.191.148.178.193.150.180 enthält 2 Chlor						2002	
176.204.219.162						2002	
177.192.159.119.134.149.91.67.210						2002	
178.134.133.132.118.76.147.91.163.....	1997						
178.135.163.147	1997						
178.193.148	1997						
178.193.150.122	1997						
178.251.108					2001		
181.128.154	1997					2002	
181.201.277.279 u. 99.125	1997						
182.153.154.152	1997						
183.156.129.228.217.81						2002	
185.186.184.187.199.152.135.91						2002	
186.187.172.158.144					2001		
186.188.190.150.151.152.115.124	1997						
187.145.119.91.205.107.161						2002	
188.189.190.191.192.153....172.118			1999				
189.146.132.161	1997	1998					
193.165.151.243	1997		1999	2000			
195.127.238.286.215.147.189	1997						
198.197.200.117.152				2000	2001		
200.185.157.109			1999				
201.203.277.279.132.125.99...überlagert	1997						
204.226.241.177....	1997						
205.206.207.208.209.77.116.143.171	1997		1999	2000	2001		
205.256.145.144.187					2001		
208.178.148.238.270				2000	2001		
209.342.223.194.91					2001		
211.179.180.148.147				2000			
211.81.117.143.253.229	1997		1999	2000	2001		
212.185.86.72	1997						
212.227.185.104.130					2001		
213.128.185.157		1998	1999	2000	2001		
213.212.185.171.157	1997		1999	2000	2001		
218.262.140.185.156	1997		1999				
222.251.205.206.207				2000			
226.211.159.75.120	1997				2001		

**Wiederholtes Auftreten von Substanzen  
im GC/MS-Screening an Messwasserleitung 1**

**Nicht identifizierte Substanzen**

Charakteristische Massen der Substanz	1997	1998	1999	2000	2001	2002	2003
227.226.130.197.170	1997		1999	2000	2001		
227.229.195.197.139.103.160.77.212	1997						
227.242.143					2001		
228.55.83.211			1999	2000			
235.132.147.163.190.280	1997						
235.209.237.193.249					2001		
240.239.196	1997						
241.132.133.131.160.228.81.173	1997		1999	2000			
243.222.187.258			1999	2000	2001		
244.147.119.91	1997				2001		
251.268.207.236.282	1997						
253.225.197.117.....überl.?	1997						
254.211.239.169.155					2001		
254.253.210.237.224.148.73.134	1997						
255.195.151.165.225.287	1997						
256.258.260.221.198					2001		
257.201.239.272	1997				2001		
258.273.165.166.180				2000	2001		
263.261.234.232.182.154.126	1997						
267.343.207.237.283.177.163	1997						
272.301.228.198.282					2001		
273.180.258.257					2001		
273.302.301.223.238					2001		
273.370.341.369.301					2001		
277.248.204.232.129			1999		2001		
277.292.147.189.55.43.44	1997				2001		
278.236.240.221.277.118	1997						
278.279.119.237.263	1997				2001		
282.338.267.323.226					2001		
283.193.223.253.179	1997						
284.242.214.181.154					2001		
291.293.263.164.235			1999				
298.230.232.88					2001		
302.204.148.98.112					2001		
313.268.270.282.121							2003
317.286.301.116.271.91							2003
318.275.241.131.91.191					2001		2003
320.261.235.277.146							2003
320.383.277.340.225					2001		2003
322.307.265					2001		2003
327.359.297.163							2003
338.282.323.173.360							2003
341.359.208			1999				2003
360.375.298.345.309					2001		
362.377.363.378					2001		
381.338.366.277.206							2003
406.186.213.199					2001		
41.57.113.171						2002	2003
41.69.83.100.99.71.43.53.112.175							2003
42.41.56.98.69				2000			
43.41.71.173.243				2000	2001	2002	2003
43.69.112.41.71.84.97.139.154							2003
43.82.97						2002	

**Wiederholtes Auftreten von Substanzen  
im GC/MS-Screening an Messwasserleitung 1**

**Nicht identifizierte Substanzen**

Charakteristische Massen der Substanz	1997	1998	1999	2000	2001	2002	2003
44.142.241							2003
55.109.113					2001		
55.170.70.98.155	1997						
55.198.126.111.155.71.97	1997						
57.155.127.85.41	1997			2000	2001		
57.85.127.155						2002	
59.43.58.45.87							2003
62.67.80.81.79.57.151.123.95.179	1997						
63.65.59.45.95.107						2002	2003
67.124.139.109.79.91.193.165.41						2002	2003
67.69.97.83.55.57.111.125.41						2002	2003
67.96.152.180							2003
68.107.141						2002	2003
68.107.55.82.94.135.160.41	1997			2000	2001	2002	
68.43.83.107						2002	2003
69.115.41	1997						2003
69.79.77.81.91.93.55			1999				
69.84.67.62.123.179	1997						
71.173.155.111.83.243.55		1998		2000			
72.170.98.126.89.109	1997						
75.141.111.95.267.355.285	1997						
75.185.153.47					2001		
78.106.136.51			1999				
79.95.109.122.145.182.230						2002	
81.67.124.96.166.222.138.152.194.225						2002	
81.79.80	1997						
81.95.123.67.152	1997				2001	2002	
81.111.229					2001	2002	
81.121.95.67.41.149.107.177.203.231						2002	
81.123.141.71.57	1997				2001	2002	
82.123.54.138	1997						
83.67.57	1997				2001	2002	
83.98.112.97.55.67					2001		
86.130.302.288.317.58.72.97.115					2001		
86.185.228.100			1999	2000			
91.119.105.133.79.146.161.206						2002	
91.146.171.188.65					2001		
91.155.171.172.184.100						2002	
91.221.143.119.234.157.178.209.79						2002	
91.93.79.67.107.117.134.281						2002	
95.110.67.79.192	1997				2001	2002	
98.100.112.67.84.126.168						2002	
99.147.159.129.83.85.69.41.113.57						2002	
99.155.113.139						2002	
99.226.286.136.166.196.256...	1997			2000	2001	2002	
Propazin + 244.169	1997						

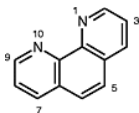
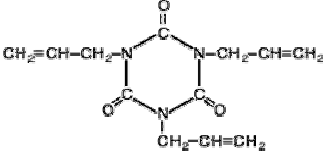
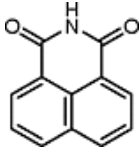
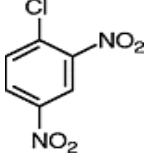
## **Anhang 3.2**

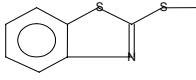
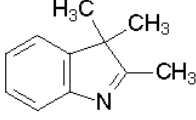
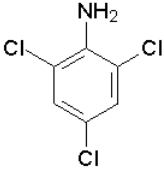
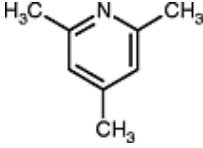

### **Stoffdatensammlung**

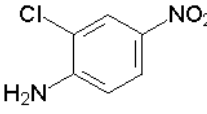
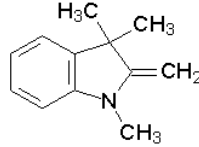
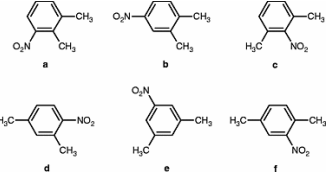
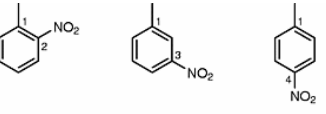
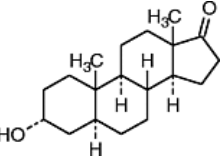


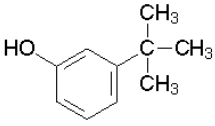
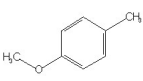
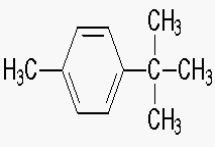
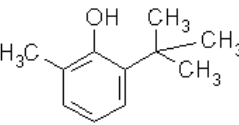
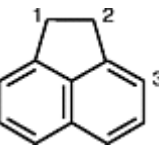


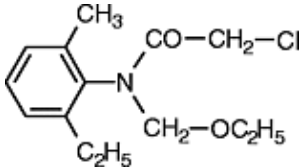
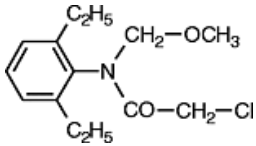
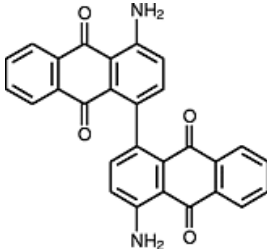
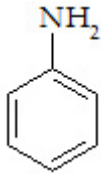
## Stoffdatensammlung ausgewählter Stoffe aus dem GC/MS-Screening

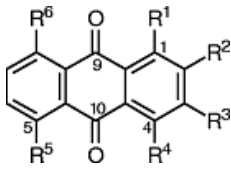
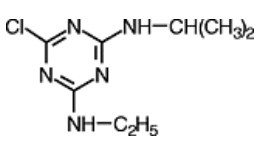
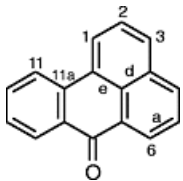
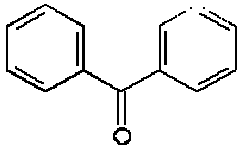
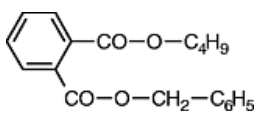
Substanz	Stoffdaten	Verwendung
1,10-Phenanthrolin	 <p> <chem>C12H8N2</chem>            MM 180,20 g/mol            CAS: 66-71-7         </p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• mit Schwermetall-Ionen schwerlös. Komplex-Verb.</li> <li>• hemmt die Photosynthese u. Carboxypeptidasen</li> </ul>
1,3,5-Triallyl-1,3,5-triazin-2,4,6-(1H,3H,5H)-trion	<p>Synonym: Triallyl-s-triazine-2,4,6(1H,3H,5H)-trione Triallyl-isocyanurat (TAIC)</p>  <p> <chem>C12H15N3O3</chem>            MM 249,2694 g/mol            CAS: 1025-15-6         </p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Vernetzer für olefin. Polymere zur Herstellung von Kunststoff z.B Kabelummantelungen, Fußbodenheizungsrohre</li> <li>• auch in Weil aus Industriebetrieb am Fluss Wiese</li> </ul>
1,8-Naphthalimid	<p>Synonym: 1<i>H</i>-Benzo[<i>de</i>]isochinolin-1,3(2<i>H</i>)-dion</p>  <p> <chem>C12H7NO2</chem>            MM 197,18 g/mol            CAS: 81-83-4         </p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Herkunft BASF</li> <li>• Synthese von optischen Aufhellern für synthetische Fasern und Kunststoffe</li> <li>• Vorstufe für andere Naphthalimide, die als Farbstoffe und organische Halbleiter Bedeutung besitzen</li> <li>• gute DNA-Interkalatoren anti-tumor-aktiv</li> <li>• mit o-Phenylendiaminen entstehen die Benzimidazol-Farbstoffe</li> <li>• WGK 1</li> </ul>
1-Chlor-2,4-dinitrobenzol	 <p> <chem>C6H3ClN2O4</chem>            MM 202,55 g/mol            CAS: 97-00-7         </p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Reagenz für Alkylierungs-, Arylierungs- u. Substitutionsreaktionen</li> <li>• zur Herst. von Farbstoffen, Photochemikalien, Explosivstoffen, Fungiziden, Kautschukchemikalien usw..</li> </ul>

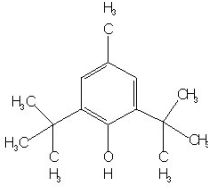
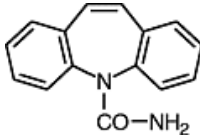
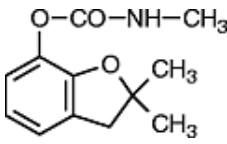
Substanz	Stoffdaten	Verwendung
2-(Methylthio)-benzothiazol	 <p data-bbox="639 465 775 539">C<sub>8</sub>H<sub>7</sub>NS<sub>2</sub> MM 181 g/mol CAS: 615-22-5</p>	<ul data-bbox="1090 300 1469 607" style="list-style-type: none"> <li>• vermutlich Derivat des 2-Mercaptobenzothiazol</li> <li>• vermutlich Abrieb von Autoreifen, bei Regen erhöhter Eintrag</li> <li>• 2-Mercaptobenzothiazol = Vulkanisationsbeschleuniger in der Kautschukindustrie, Kühlmittelzusatz, Korrosionsschutzmittel, Flotationsmittel, Komplexligand</li> </ul>
2,3,3-Trimethyl-3H-indol	<p data-bbox="639 656 858 707">Synonym: 2,3,3-Trimethylindolenin</p>  <p data-bbox="639 882 783 956">C<sub>11</sub>H<sub>13</sub>N MM 159 g/mol CAS: 1640-39-7</p>	<ul data-bbox="1090 656 1209 685" style="list-style-type: none"> <li>• WGK 1</li> </ul>
2,4,6-Trichloranilin	 <p data-bbox="639 1234 802 1308">C<sub>6</sub>H<sub>4</sub>Cl<sub>3</sub>N MM 196,46 g/mol CAS: 634-93-5</p>	<ul data-bbox="1090 1003 1209 1032" style="list-style-type: none"> <li>• WGK 3</li> </ul>
2,4,6-Trimethylpyridin	<p data-bbox="639 1355 730 1406">Synonym: Kollidin</p>  <p data-bbox="639 1592 802 1666">C<sub>8</sub>H<sub>11</sub>N MM 121,18 g/mol CAS: 108-75-8</p>	<ul data-bbox="1090 1355 1469 1608" style="list-style-type: none"> <li>• im Steinkohlenteer in kleinen Mengen</li> <li>• bei organischen Synthesen, z.B. in Dehydrohalogenierungsreaktionen</li> <li>• zur Herstellung von Arzneimitteln</li> <li>• WGK 2</li> </ul>
2,4-Dimethyl-6-tertiär-butylphenol	<p data-bbox="639 1713 735 1765">Synonym: Topanol A</p>  <p data-bbox="639 1906 810 1980">C<sub>12</sub>H<sub>18</sub>O MM 178,271 g/mol CAS: 1879-09-0</p>	<ul data-bbox="1090 1713 1437 1809" style="list-style-type: none"> <li>• Klebstoff – Additiv</li> <li>• als Antioxidant und Therm stabilisator</li> </ul>

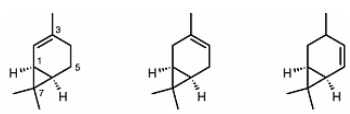
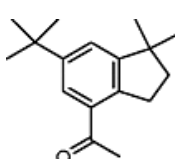
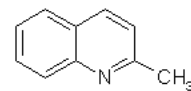
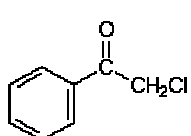
Substanz	Stoffdaten	Verwendung
2-Chlor-4-nitroanilin	 <p>C<sub>6</sub>H<sub>5</sub>ClN<sub>2</sub>O<sub>2</sub> MM 172,57 g/mol CAS: 121-87-9</p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• für Azofarbstoffe</li> <li>• für Dispersionsfarbstoffe zur Färbung von Acetatseide, Polyester u. Polyamidfasern</li> <li>• für roten Farbstoff für die Färbung von Polyacrylnitrilfasern</li> <li>• zur Synthese von Herbiziden, Molluskiziden und Antihelminthika</li> <li>• WGK 2</li> </ul>
2-Methylen-1,3,3-trimethylindol	<p>Synonym: 2-Methylen-1,3,3-trimethylindilin Fischer Base</p>  <p>C<sub>12</sub>H<sub>15</sub>N<sub>1</sub> MM 173,26 g/mol CAS: 118-12-7</p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• WGK 2</li> </ul>
2-Nitro-m-xylol	 <p>C<sub>8</sub>H<sub>9</sub>NO<sub>2</sub> MM 151,16 g/mol 2-N. CAS: 81-20-9</p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Zwischenprodukte bei der Synthese der entsprechenden Amine und daraus abgeleiteter Farbstoffe und Arzneimittel</li> </ul>
2-Nitrotoluol	 <p>C<sub>7</sub>H<sub>7</sub>NO<sub>2</sub> MM 137,13 g/mol 2-N. CAS: 88-72-2</p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Zwischenprodukte für Farbstoffe, Kunststoffe, Pharmazeutika, Riechstoffe und Sprengstoffe (TNT).</li> <li>• Polyurethan-Vorprodukte</li> <li>• 2-N. zur Herstellung von Indolen</li> </ul>
3-Ethyl-3-hydroxy-5-(alpha.)-androstan-17-on	<p>Synonyme: (3 α-Hydroxy-5 α-androstan-17-on). Androsteron</p>  <p>C<sub>19</sub>H<sub>30</sub>O<sub>2</sub> MM 290,43 g/mol</p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Abkömmling des Testosteronstoffwechselproduktes Androsteron</li> </ul>

Substanz	Stoffdaten	Verwendung
3-tertiär-Butylphenol	 <p>C<sub>10</sub>H<sub>14</sub>O<sub>1</sub> MM 150,22 g/mol CAS: 585-34-2</p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• WGK 2</li> </ul>
4-Methylanisol	 <p>C<sub>8</sub>H<sub>10</sub>O MM 122,17 g/mol CAS: 104-93-8</p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Herkunft von BASF</li> <li>• WGK 1</li> <li>• In Ylang Ylang Öl</li> </ul>
4-tert.-Butylbenzylmethylether	CAS: 3395-87-7	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Herkunft von BASF</li> </ul>
4-tertiär-Butyltoluol	<p>Synonym: p-TBT</p>  <p>C<sub>11</sub>H<sub>16</sub> MM 148,25 g/mol CAS: 98-51-1</p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Lösungsmittel</li> <li>• WGK 2</li> </ul>
6-tertiaer-Butyl-o-kresol	<p>Synonym: 2-tert-Butyl-6-methylphenol</p>  <p>C<sub>11</sub>H<sub>16</sub>O<sub>1</sub> MM 164,25 g/mol CAS: 2219-82-1</p>	
Acenaphthen	 <p>C<sub>12</sub>H<sub>10</sub> MM 154,21 g/mol CAS: 83-32-9</p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Zwischenprodukt bei der Synth. von Naphthalsäure, A.-Formaldehyd-Harzen, Farb- u. Kunststoffen sowie Insektiziden</li> </ul>

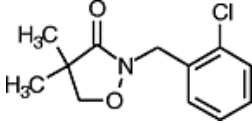
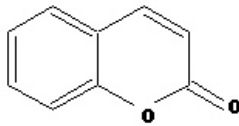
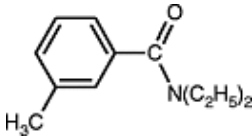
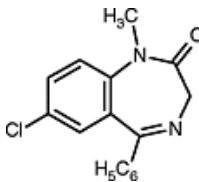
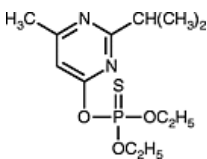
Substanz	Stoffdaten	Verwendung
Acetochlor	Synonym: 2-Chlor- <i>N</i> -(ethoxymethyl)- <i>N</i> -(2-ethyl-6-methylphenyl)acetamid  $C_{14}H_{20}ClNO_2$ MM 269,77 g/mol CAS: 34256-82-1	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Herbizid</li> </ul>
Alachlor	Synonym: 2-Chlor- <i>N</i> -(2,6-diethylphenyl)- <i>N</i> -(methoxymethyl)acetamid  $C_{14}H_{20}ClNO_2$ MM 269,77 g/mol CAS: 15972-60-8	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Herbizid</li> </ul>
Aminoanthrachinone	 PR 177 $C_{28}H_{16}N_2O_4$ MM 444,45 g/mol	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Rotpigment</li> <li>• in Industrie-Lacken</li> <li>• Druckfarbe im Wertpapierdruck</li> </ul>
Anilin	 $C_6H_7N$ MM 93,13 g/mol CAS: 62-53-3	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Ausgangsstoff für die Synthese von Farben und Kunstfasern, aber auch zur Herstellung von Kautschuk und Medikamenten. Vorläufersubstanz für aromat. Chemie, z.B. für Isocyanate</li> </ul>

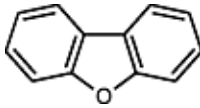
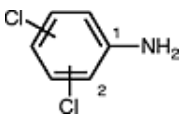
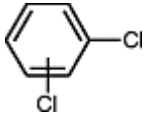
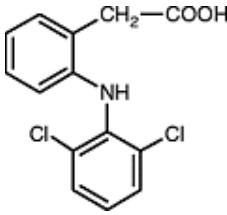
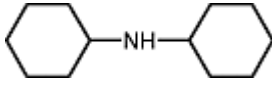
Substanz	Stoffdaten	Verwendung
Anthrachinon	 <p>R=H C<sub>14</sub>H<sub>8</sub>O<sub>2</sub> MM 208,22 g/mol CAS: 84-65-1</p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Ausgangsprodukt für viele Farbstoffe</li> <li>• Vogelrepellent</li> <li>• verw. in der Papier-Industrie</li> </ul>
Atrazin	 <p>C<sub>8</sub>H<sub>14</sub>ClN<sub>5</sub> MM 15,69 g/mol CAS: 1912-24-9</p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Herbizid</li> <li>• seit 1991 verboten</li> </ul>
Benzanthron	<p>Synonym: (7<i>H</i>-Benz[<i>de</i>]anthracen-7-on)</p>  <p>C<sub>17</sub>H<sub>10</sub>O MM 230,27 g/mol CAS: 82-05-3</p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Herkunft BASF</li> <li>• Ausgangsmaterial für Farbstoffe</li> </ul>
Benzophenon	<p>Synonym: Diphenylketon</p>  <p>C<sub>13</sub>H<sub>10</sub>O, MM 182,22 CAS: 119-61-9</p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Zwischenprodukt bei Synth. von Antihistaminika, Schlafmittel u.a. Pharmazeutika, Insektiziden</li> <li>• als Geruchsfixateur für Parfüme u. Seifen</li> <li>• B.-Einkrist. in der Piezoelektrik u. Elektrooptik</li> <li>• B.-Derivate als UV-Absorber in Sonnenschutzmittel</li> </ul>
Benzylbutylphthalat (BBP)	 <p>C<sub>19</sub>H<sub>20</sub>O<sub>4</sub> MM 312,37 g/mol CAS: 85-68-7</p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Weichmacher für Nitrolacke u. Kunststoffe</li> </ul>

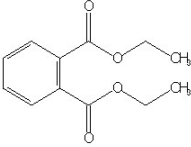
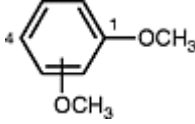
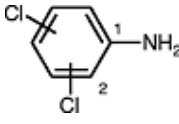
Substanz	Stoffdaten	Verwendung
Butyl-hydroxy-toluol BHT	Synonym: 2.6-Di-tert.-butyl-4-methylphenol 2.6-Di-tert.-butyl-p-kresol 3.5-Di-tert.-butyl-p-hydroxytoluol  C <sub>15</sub> H <sub>24</sub> O CAS-Nr. 128-37-0	<ul style="list-style-type: none"> <li>• künstlich hergestelltes, lebensmittelrechtlich zugelassenes Antioxidationsmittel mit der E-Nummer E321, das den Oxidationsprozess von organischen Verbindungen verhindert bzw. hemmt</li> <li>• Einsatz bei der Herstellung von: Schmiermitteln, industriellen Ölen, Treibstoffen, Elastomeren, Polymeren, Klebstoffen, Epoxidharzen, Farben, Druckfarben, Kosmetika, Arzneimitteln, Lebensmitteln.</li> <li>• im Kaugummi</li> <li>• Säuerungsmittel, Konservierungsmittel und Aromastabilisator in Lebensmitteln, allergieauslösend</li> <li>• reichert sich im Fettgewebe an. Im Tierversuch Veränderungen an Immunsystem, Schilddrüse, Leber und im Blutbild.</li> </ul>
Carbamazepin	 C <sub>15</sub> H <sub>12</sub> N <sub>2</sub> O MM 236,27 g/mol CAS: 298-46-4	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Antiepileptikum</li> </ul>
Carbofuran	Synonym: 2,3-Dihydro-2,2-dimethylbenzofuran-7-yl-methylcarbammat  C <sub>12</sub> H <sub>15</sub> NO <sub>3</sub> MM 221,26 g/mol	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Insektizid, Akarizid u. Nematizid mit breitem Wirkungsspektrum</li> </ul>

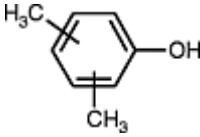
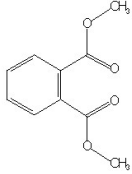
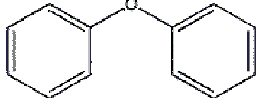
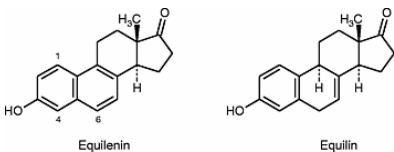
Substanz	Stoffdaten	Verwendung
Caren	Synonym: (3,7,7-Trimethylbicyclo[4.1.0]hept-2-, -3-en u. -4-en; 2-, 3- u. 4-Caren)  (+)-2-Caren      (+)-3-Caren      (+)-4-Caren C <sub>10</sub> H <sub>16</sub> , MM 136,24 g/mol CAS: 4497-92-1 ((+)-2-C.) 498-15-7 ((+)-3-C.) 13466-78-9 ((-)-3-C.)	<ul style="list-style-type: none"> <li>Ozonisierungsprodukte werden in der Parfümindustrie verwendet</li> </ul>
Celestolide (ADBI)	 C <sub>17</sub> H <sub>24</sub> O, MM 244,38 g/mol CAS: 13171-00-1	<ul style="list-style-type: none"> <li>Duftstoff in Wasch- und Reinigungsmitteln, Körperpflegemitteln sowie in Nahrungsmitteln, Genusswaren, Papier und Textilien</li> </ul>
Chinaldin	Synonym: 2-Methylchinolin  C <sub>10</sub> H <sub>9</sub> N MM 143,18 g/mol CAS: 91-63-4	<ul style="list-style-type: none"> <li>Synthese von Farbstoffe</li> <li>Ligand für Übergangsmetalle</li> <li>Vorstufe in Heterocyclen-Synthese</li> <li>WGK 2</li> </ul>
Chloracetophenon	Synonym: 2-Chlor-1-phenyl-ethanon, Phenacylchlorid,  <b>o-Chloracetophenon</b> C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> ClO, MM 154,60 g/mol CAS: 532-27-4	<ul style="list-style-type: none"> <li>Tränengas, CN-Reizstoff</li> </ul>

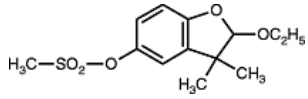
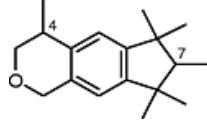
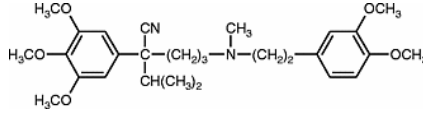
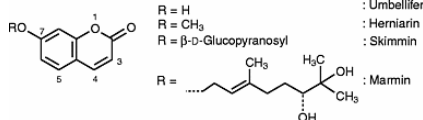
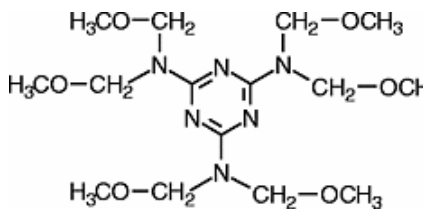



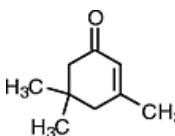
Substanz	Stoffdaten	Verwendung
Clomazon = Dimethazon	Synonym: 2-(2-Chlorbenzyl)-4,4-dimethylisoxazolidin-3-on.  $C_{12}H_{14}ClNO_2$ MM 239,70 g/mol CAS: 81777-89-1	<ul style="list-style-type: none"> <li>• selektives Herbizid</li> </ul>
Cumarin	 $C_9H_6O_2$ MM 146,14 g/mol CAS: 91-64-5	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Thrombose-Therapie</li> <li>• Cumarinderivate als Rodentizid</li> <li>• Riechstoff in Parfüms u. Seifenparfümierung</li> <li>• Fixateur</li> <li>• Odorierung technischer Produkte</li> </ul>
DEET (N,N-Diethyltoluamid)	Synonym: (N,N-Diethyl-3-methylbenzamid, DEET)  $C_{12}H_{17}NO$ MM 191,27 g/mol CAS: 134-62-3	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Repellent (Wirkstoff von Auktan)</li> </ul>
Diazepam (Valium)	Synonym: 7-Chlor-1-methyl-5-phenyl-1,3-dihydro-1,4-benzodiazepin-2-on  $C_{16}H_{13}ClN_2O$ MM 284,75 g/mol CAS: 439-14-5	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Tranquilizer</li> <li>• Wirkstoff von Valium</li> </ul>
Diazinon	 $C_{12}H_{21}N_2O_3PS$ MM 304,35 g/mol CAS: 333-41-5	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Insektizid und Akarizid</li> </ul>

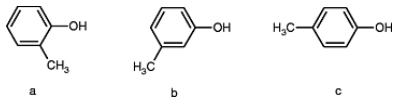
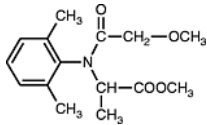
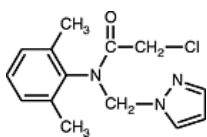
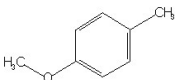
Substanz	Stoffdaten	Verwendung
Dibenzofuran	 <p>C<sub>12</sub>H<sub>8</sub>O MM 168,19 g/mol CAS: 132-64-9</p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Bestandteil von Wärmebadmischungen u. Kerzenmassen sowie zur Herst. von Biphenolen verwendet</li> </ul>
Dichloraniline	 <p>C<sub>6</sub>H<sub>5</sub>Cl<sub>2</sub>N MM 162,02 g/mol CAS: 608-27-5 (2,3-D) 554-00-7 (2,4-D) 95-82-9 (2,5-D) 608-31-1 (2,6-D) 95-76-1 (3,4-D) 626-43-7 (3,5-D)</p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Zwischenprodukt bei der Herst. von Arzneimitteln, Farbstoffen, Schädlingsbekämpfungs- u. Pflanzenschutzmitteln</li> </ul>
Dichlorbenzole	 <p>C<sub>6</sub>H<sub>4</sub>Cl<sub>2</sub> MM 147,00 g/mol CAS: 95-50-1 (1,2-D.) 541-73-1 (1,3-D.) 106-46-7 (1,4-D.)</p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Herkunft u.a. BASF</li> <li>• für Beschichtungsstoffe auf Teer- bzw. Asphaltbasis</li> <li>• Zwischenprodukte zur Herst. von Farbstoffen, Schädlingsbekämpfungsmitteln, Lsm. für Gummi, Wachse u. Desinfektionsmittel</li> <li>• 1,4-D.: Mottenbekämpfungs- u. Luftverbesserungsmitteln (Beckensteine)</li> </ul>
Diclofenac	<p>Synonym: [2-(2,6-Dichloranilino)-phenyl]essigsäure</p>  <p>C<sub>14</sub>H<sub>11</sub>Cl<sub>2</sub>NO<sub>2</sub> MM 296,15 g/mol CAS: 15307-86-5 (D.)</p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• antiphlogist. Antirheumatikum</li> <li>• Wirkstoff von Voltaren</li> <li>• Generikum</li> </ul>
Dicyclohexylamin	 <p>C<sub>12</sub>H<sub>23</sub>N MM 181,32 g/mol CAS: 101-83-7</p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• als Zwischenprodukt bei der Synth. von Öladditiven, Insektiziden, Emulgatoren, Korrosionsverhinderern, Weichmachern, Vulkanisationsbeschleunigern, Farbstoffen</li> </ul>

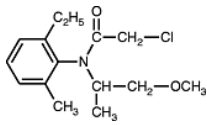
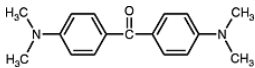
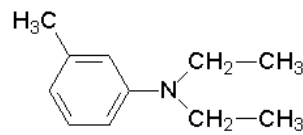
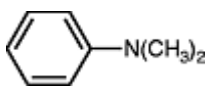
Substanz	Stoffdaten	Verwendung
Diethylphthalat (DEP)	 <p data-bbox="639 607 802 678">C<sub>12</sub>H<sub>14</sub>O<sub>4</sub> MM 222,24 g/mol CAS: 84-66-2</p>	<ul data-bbox="1090 300 1449 483" style="list-style-type: none"> <li>• Weichmacher</li> <li>• Verw. in Dispersionsfarben u. Kunststoffputzen</li> <li>• Parfüm-Fixatur u. Denaturierung des Parfümalkohols</li> <li>• WGK 2</li> </ul>
Di-iso-octyladipinsäureester	<p data-bbox="639 730 850 779">Synonym: Di(2-ethylhexyl)adipate</p> <p data-bbox="639 846 767 873">CAS 103-23-1</p>	<ul data-bbox="1090 730 1469 913" style="list-style-type: none"> <li>• Adipate sind vor allem als Tief-temperatur-Weichmacher für PVC und für CN-Lacke bekannt; Adipate sind in dieser Beziehung den Phthalaten überlegen</li> </ul>
Dimethoxybenzoler	 <p data-bbox="639 1126 802 1272">C<sub>8</sub>H<sub>10</sub>O<sub>2</sub> MM 138,17 g/mol CAS: 91-16-7 (1,2-D.) 151-10-0 (1,3-D.) 150-78-7 (1,4-D.)</p>	<ul data-bbox="1090 965 1465 1328" style="list-style-type: none"> <li>• 1,2-D. (Brenzcatechindimethylether, Veratrol, WGK 2 Zwischenprodukt bei Naturstoff-synthesen)</li> <li>• 1,3-D. (Resorcindimethylether), Zwischenprodukt bei Farbstoff-Synth.; zugelassen als Lebensmittelzusatzstoff</li> <li>• 1,4-D. (Hydrochinondimethylether) als Fixateur in der Parfümerie, für Farbstoff-Synth. u. als Sonnenschutzmittel</li> </ul>
Dimethylaniline (Xylidine)	 <p data-bbox="639 1529 802 1753">C<sub>6</sub>H<sub>5</sub>Cl<sub>2</sub>N MM 162,02 g/mol CAS: 608-27-5 (2,3-D) 554-00-7 (2,4-D) 95-82-9 (2,5-D) 608-31-1 (2,6-D) 95-76-1 (3,4-D) 626-43-7 (3,5-D)</p>	<ul data-bbox="1090 1379 1469 1503" style="list-style-type: none"> <li>• Zwischenprodukt bei der Herst. von Arzneimitteln, Farbstoffen, Schädlingsbekämpfungs- u. Pflanzenschutzmitteln</li> </ul>

Substanz	Stoffdaten	Verwendung
Dimethylphenol	 <p> <math>C_8H_{10}O</math>            MM 122,17 g/mol            CAS:            526-75-0 (a)            105-67-9 (b)            95-87-4 (c)            576-26-1 (d)            95-65-8 (e)            108-68-9 (f)         </p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• zur Desinfektion, zur Herst. antisept. Seifen u. antiparasitärer Waschmittel</li> <li>• zur Herst. von Insektiziden, von Kunststoffen, Lack-Kunstharzen, Phenoplasten usw.</li> <li>• 2,6-D. ist das Ausgangsprodukt für Polyphenylenoxid, einem thermoplast. Kunststoff mit hoher Temp.- u. Chemikalien-Beständigkeit</li> </ul>
Dimethylphthalat (DMP)	 <p> <math>C_{10}H_{10}O_4</math>            MM 194,19 g/mol            CAS: 131-11-3         </p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• als Weichmacher in der Gummiindustrie</li> <li>• als Weichmacher in der Druckindustrie</li> <li>• als Weichmacher in der Farben- und Lackindustrie</li> <li>• als Weichmacher/Verdünnungsmittel Bestandteil von ölhaltigen Mikrokapselbeschichtungen bei der Papierveredelung</li> <li>• als Hilfsstoff bei der Verarbeitung von PVC</li> <li>• in Kosmetika als Filmbildner, Lösungsmittel und Duftstoffbestandteil</li> <li>• Verw. zur Phlegmatisierung von Peroxiden</li> <li>• Repellents</li> <li>• WGK 1</li> </ul>
Diphenylether	 <p> <math>C_{12}H_{10}O</math>            MM 170,21 g/mol            CAS: 101-84-8         </p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Rosenparfüm für Seifen u. Detergenzien</li> <li>• Wärmeübertragungsmittel</li> <li>• WGK 2</li> <li>• Polybromierte Diphenylether (PBDE) als Flammschutzmittel</li> </ul>
Equilin	 <p> <math>C_{18}H_{18}O_2</math>            MM 266,34 g/mol            CAS: 474-86-2 (Equilin)         </p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• weibliches Geschlechtshormon</li> </ul>

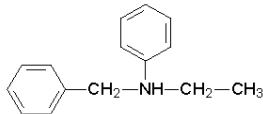
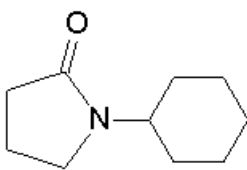
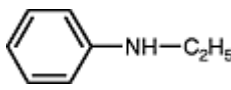
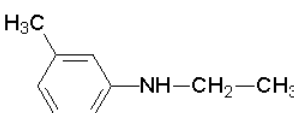
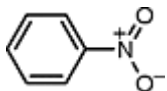
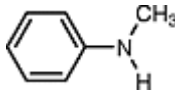
Substanz	Stoffdaten	Verwendung
Ethofumesate	 <p>C<sub>13</sub>H<sub>18</sub>O<sub>5</sub>S MM 286,35 g/mol CAS: 26225-79-6</p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>Herbizid</li> </ul>
Galaxolid	 <p>C<sub>18</sub>H<sub>26</sub>O MM 258,40 g/mol CAS: 1222-05-5</p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>Duftstoff in Wasch- u. Reinigungsmitteln, Körperpflegemitteln sowie in Nahrungsmitteln, Genusswaren, Papier und Textilien</li> </ul>
Gallopamil	<p>Synonym: 5-[(3,4-Dimethoxyphenethyl)methyl-amino]-2-isopropyl-2-(3,4,5-trimethoxyphenyl)-valeronitril</p>  <p>C<sub>28</sub>H<sub>40</sub>N<sub>2</sub>O<sub>5</sub> MM 484,64 g/mol CAS: 16662-47-8</p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>Wirkstoff von Procorum</li> <li>Calcium-Antagonist bei Herz/Kreislauf-Erkrankungen</li> </ul>
Herniarin	<p>Synonym: 7-Methoxy-2H-1-benzopyran-2-on 7-Methoxycoumarin</p>  <p>C<sub>10</sub>H<sub>8</sub>O<sub>3</sub> MM 176,17 g/mol CAS: 531-59-9 (Herniarin)</p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>Inhaltsstoff von Blättern verschiedener Pflanzen wie Bruchkraut und Wasserhanf</li> </ul>
Hexa-(methoxymethyl)-melamin (HMMM)		<ul style="list-style-type: none"> <li>in Einbrennlacken</li> <li>Melamin-Harze als Duroplaste, Leime und Klebstoffe, als Vernetzer für Beschichtungen, Bestandteil von Farben, Lacken und wird auch in der Textilfärberei eingesetzt, als Bindemittel in der Oberflächenbeschichtung</li> </ul>
Hydrodehydrolinalool	<p>C<sub>10</sub>H<sub>18</sub>O<sub>1</sub> MM 154,25 g/mol CAS: 1604-26-8</p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>Herkunft BASF</li> <li>WGK 2</li> </ul>
Iminostilben		<ul style="list-style-type: none"> <li>Abbauprodukt Carbamazepin</li> </ul>

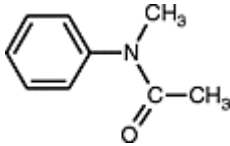
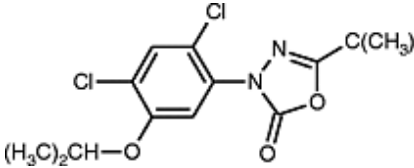
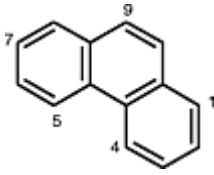
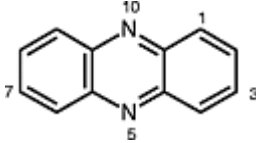
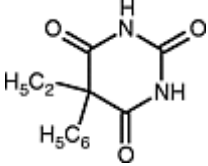
Substanz	Stoffdaten	Verwendung
Indol	Synonym: 1H-Benzo[b]pyrrol;  C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> N MM 117,15 g/mol CAS: 120-72-9	<ul style="list-style-type: none"> <li>• in der Parfümerie bei der Herst. von künstlichem Jasmin- u. Neroliöl verwendet</li> <li>• Ausgangsprodukt für die Synth. von 1H-Indol-3-yllessigsäure, Tryptophan, Pharmazeutika u. Farbstoffen</li> </ul>
Iso-Chloridazon	CAS: 1698-61-9	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Herkunft BASF</li> </ul>
Isophoron	Synonym: 3,5,5-Trimethyl-2-cyclohexen-1-on  C <sub>9</sub> H <sub>14</sub> O MM 138,21 g/mol CAS: 78-59-1	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Herkunft BASF</li> <li>• Rohstoff zur Herst. von Diisocyanaten u. Diaminen</li> <li>• in Beschichtungsstoffen bzw. Druckfarben, bes. bei Einbrennlacken, zur Verbesserung des Glanzes u. Verlaufes</li> <li>• gutes Lösevermögen für Bindemittel, Harze und Chemieprodukte</li> <li>• als hochsiedendes Lösemittel in der Lack-, Druckfarben- und Klebstoffindustrie</li> <li>• verbessert die Fließeigenschaften von Farben, Lacke und erhöht deren Glanz</li> <li>• als Rohstoff zur Herstellung chemischer Produkte</li> </ul>
Isophoronitril	CAS:	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Herkunft BASF</li> </ul>
Kohlenwasserstoffe		<ul style="list-style-type: none"> <li>• als Brennstoffe, Motorkraftstoffe (Benzin, Diesel- u.a. Kraftstoffe), als Lsm. u. Schmierstoff u. als Ausgangsverb. in der organ. Synthese</li> </ul>

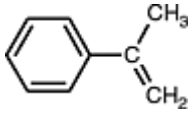
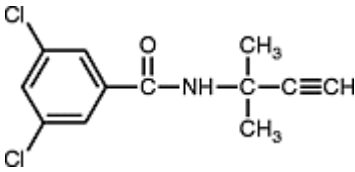
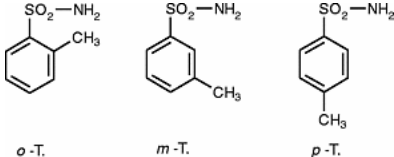
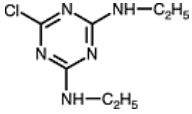
Substanz	Stoffdaten	Verwendung
Kresol	 <p> <math>C_7H_8O</math>            MM 108 g/mol            CAS:            95-48-7 (a)            108-39-4 (b)            106-44-5 (c)         </p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• zu Desinfektionszwecken</li> <li>• als Emulgator</li> <li>• zur Bekämpfung von Blatt- und Schildläusen</li> <li>• zur Herstellung von Kresol-Harzen, als Lösemittel für Drahtüberzüge, in Form ihrer Phosphorsäureester (z.B. Trikresylphosphat) als Hydraulikflüssigkeiten usw. sowie zur Herstellung von Kresyl-Verbindungen verwendet.</li> <li>• o-Kresol zur Herstellung von Herbiziden und Insektiziden</li> <li>• p-Kresol zur Herstellung von Butylhydroxytoluol (BHT), das als Antioxidans und Alterungsschutzmittel für Kunststoffe, Schmieröle und Nahrungsmittel verwendet wird</li> </ul>
Metalaxyl	 <p> <math>C_{15}H_{21}NO_4</math>            MM 279,33 g/mol            CAS: 57837-19-1         </p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Fungizid</li> </ul>
Metazachlor	 <p> <math>C_{14}H_{16}ClN_3O</math>            MM 277,75 g/mol            CAS: 67129-08-2         </p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Herbizid</li> </ul>
Methylanisol	<p>Synonym: p-Kresolmethylether</p>  <p> <math>C_8H_{10}O</math>            MM 122,17 g/mol         </p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Herkunft BASF</li> <li>• Duftstoff von Ylangöl</li> <li>• WGK 1</li> </ul>

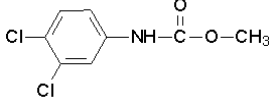
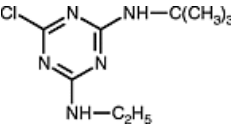
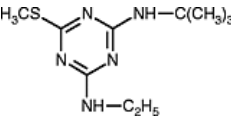
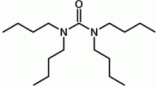
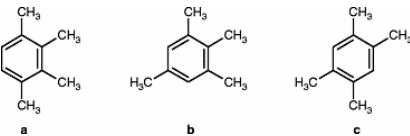
Substanz	Stoffdaten	Verwendung
Metolachlor	 <p>C<sub>15</sub>H<sub>22</sub>ClNO<sub>2</sub> MM 283,79 g/mol</p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>Herbizid</li> </ul>
Michlers Keton	 <p>C<sub>17</sub>H<sub>20</sub>N<sub>2</sub>O MM 268,35 g/mol CAS: 90-94-8</p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>Herkunft BASF</li> <li>Zwischenprodukt bei Farbstoffsynthesen</li> <li>als Diarylketon Photosensibilisator.</li> <li>in der Polymerchemie als Photoinitiator bzw. Vernetzer.</li> </ul>
Mono-iso-octyladipinsäureester		<ul style="list-style-type: none"> <li>Adipate sind vor allem als Tieftemperatur-Weichmacher für PVC und für CN-Lacke bekannt; Adipate sind in dieser Beziehung den Phthalaten überlegen</li> </ul>
N-(2,6-Dimethylphenyl)-N-(methyl-1-pyrazol)-1-Pyrazolessigsäureamid	CAS: 76512-54-4	<ul style="list-style-type: none"> <li>Herkunft aus Kläranlagenauslauf der BASF</li> </ul>
N,N-Dibutylformamid	C <sub>9</sub> H <sub>19</sub> N <sub>1</sub> O <sub>1</sub> MM: 157,26 g/mol CAS: 761-65-9	<ul style="list-style-type: none"> <li>WGK 1</li> </ul>
N,N-Diethylanilin	C <sub>10</sub> H <sub>15</sub> N <sub>1</sub> MM 149,24 g/mol CAS: 91-66-7	<ul style="list-style-type: none"> <li>Herkunft BASF</li> <li>Synth. von Farbstoffen</li> </ul>
N,N-Diethyltoluidin	 <p>C<sub>11</sub>H<sub>17</sub>N<sub>1</sub> MM 163,26 g/mol CAS: 91-67-8</p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>WGK 2</li> </ul>
N,N-Dimethylanilin	 <p>C<sub>8</sub>H<sub>11</sub>N MM 121,18 g/mol CAS: 121-69-7</p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>Synth. von Farbstoffen, Vanillin, Benzothiazol</li> </ul>

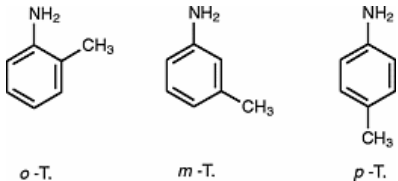
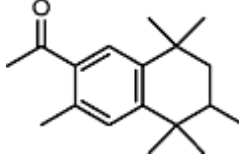
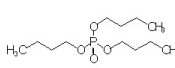


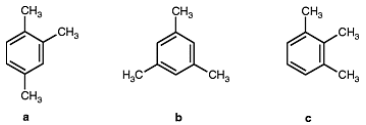
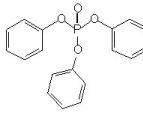
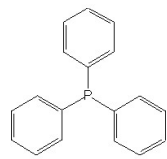
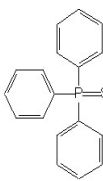
Substanz	Stoffdaten	Verwendung
N-Benzyl-N-ethylanilin	 <p data-bbox="638 470 805 548">C<sub>15</sub>H<sub>17</sub>N<sub>1</sub> MM 211,31 g/mol CAS: 92-59-1</p>	<ul data-bbox="1085 291 1212 324" style="list-style-type: none"> <li>• WGK 2</li> </ul>
N-Cyclohexyl-2-pyrrolidon	 <p data-bbox="638 817 805 896">C<sub>10</sub>H<sub>17</sub>N<sub>1</sub>O<sub>1</sub> MM 167,25 g/mol CAS: 6837-24-7</p>	<ul data-bbox="1085 593 1300 660" style="list-style-type: none"> <li>• Herkunft BASF</li> <li>• WGK 1</li> </ul>
N-Ethylanilin	 <p data-bbox="638 1064 805 1131">C<sub>8</sub>H<sub>11</sub>N<sub>1</sub> MM 121,18 g/mol CAS: 103-69-5</p>	<ul data-bbox="1085 940 1444 996" style="list-style-type: none"> <li>• zur organ. Synth., insbes. von Farbstoffen u. Pharmazeutika</li> </ul>
N-Ethyltoluidin	 <p data-bbox="638 1355 805 1422">C<sub>9</sub>H<sub>13</sub>N<sub>1</sub> MM 135,21 g/mol CAS: 102-27-2</p>	<ul data-bbox="1085 1176 1189 1209" style="list-style-type: none"> <li>• WGK</li> </ul>
Nitrobenzol	 <p data-bbox="638 1601 805 1668">C<sub>6</sub>H<sub>5</sub>NO<sub>2</sub> MM 123,11 g/mol CAS: 98-95-3</p>	<ul data-bbox="1085 1467 1460 1724" style="list-style-type: none"> <li>• u.a. von BASF</li> <li>• WGK 2</li> <li>• für die Herstellung von Anilin u.a. org. Stickstoffverbindungen</li> <li>• Schmierölbestandteil,</li> <li>• Zusatz bei Dynamit- und Bergwerkssprengstoffen</li> </ul>
N-Methylanilin	 <p data-bbox="638 1904 805 1971">C<sub>7</sub>H<sub>9</sub>N<sub>1</sub> MM 107,16 g/mol CAS: 100-61-8</p>	<ul data-bbox="1085 1769 1428 1825" style="list-style-type: none"> <li>• als Reagenz bei chemischen Umsetzungen usw.</li> </ul>

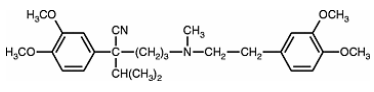
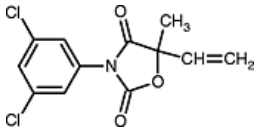
Substanz	Stoffdaten	Verwendung
N-Methyl-N-phenyl-acetamid	 <p>C<sub>9</sub>H<sub>11</sub>NO MM 149,19 g/mol CAS: 579-10-2</p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• in der Celluloidindustrie als Campher-Ersatz</li> <li>• früher als Analgetikum</li> </ul>
Oxadiazon	<p>Synonym: 5-<i>tert</i>-Butyl-3-(2,4-dichlor-5-isopropoxyphenyl)-1,3,4-oxadiazol-2(3<i>H</i>)-on</p>  <p>C<sub>15</sub>H<sub>18</sub>Cl<sub>2</sub>N<sub>2</sub>O<sub>3</sub> MM 345,22 g/mol CAS: 19666-30-9</p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• selektives Herbizid</li> </ul>
Phenanthren	 <p>C<sub>14</sub>H<sub>10</sub> MM 178,23 g/mol CAS: 85-01-8</p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• zu Synth. von Farbstoffen, Arzneimitteln u. Herbiziden</li> </ul>
Phenazin	 <p>C<sub>12</sub>H<sub>8</sub>N<sub>2</sub> MM 180,20 g/mol CAS: 92-82-0</p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Grundkörper zahlreicher techn. u. biochem. wichtiger Farbstoffe</li> <li>• für farbigen Antibiotika</li> </ul>
Phenobarbital MTB1	<p>Synonym: Phenobarbital 5-Ethyl-5-phenylbarbitursäure</p>  <p>C<sub>12</sub>H<sub>12</sub>N<sub>2</sub>O<sub>3</sub> MM 232,23 g/mol CAS: 50-06-6 (P.) 57-30-7 (Natriumsalz)</p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• vermutlich Metabolit von Phenobarbital, das als Antiepileptikum, Hypnotikum u. Sedativum verwendet wird</li> </ul>

Substanz	Stoffdaten	Verwendung
Propenylbenzol	 <p><chem>C9H10</chem> MM 118 g/mol</p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• zur Herstellung von niederpolymere Produkten, die als Weichmacher in Kunststoffen, Farben, Wachsen usw. verwendet werden</li> <li>• Herstellung modifizierter Polyester- und Alkydharze und von Copolymeren mit Methylmethacrylat</li> </ul>
Propyzamid	<p>Synonym: 3,5-Dichlor-N-(1,1-dimethyl-2-propynyl)benzamid</p>  <p><chem>C12H11Cl2NO</chem> MM 256,13 g/mol CAS: 23950-58-5</p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Herbizid</li> </ul>
p-Toluolsulfonamid	<p>Synonym: Methylbenzolsulfonamide)</p>  <p><chem>C7H9NO2S</chem> MM 171,21 g/mol CAS: 88-19-7 (a) 1899-94-1 (b) 70-55-3 (c)</p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• o-T :Zwischenprodukt bei der Herst von Saccharin</li> <li>• p-T. (PTSA): Ausgangsprodukt für orale Antidiabetika, Zwischenprodukt bei Farbstoffsynthese.; Zwischenprodukt in organ. Synthesen</li> </ul>
Simazin	<p>Synonym: 6-Chlor-N<sup>2</sup>,N<sup>4</sup>-diethyl-1,3,5-triazin-2,4-diamin, <chem>C7H12ClN5</chem>,</p>  <p>MM 201,65 g/mol CAS: 122-34-9</p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Herbizid</li> </ul>
Surfynol E102	<p>2,4,7,9-Tetramethyl-5-decyne-4,7-diol CAS: 126-86-3</p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Tensid</li> </ul>

Substanz	Stoffdaten	Verwendung
Swep	Synonym: Methyl-3,4-dichlorphenylcarbammat  $C_8H_7Cl_2N_1O_2$ MM 220,05 g/mol CAS: 1981-18-9	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Herbizid</li> </ul>
Terbutylazin	Synonym: $N^2$ - <i>tert</i> -Butyl-6-chlor- $N^4$ -ethyl-1,3,5-triazin-2,4-diamin  $C_9H_{16}ClN_5$ MM 229,71 g/mol CAS: 5915-41-3	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Herbizid</li> <li>• Photosynthese-Hemmer am Photosystem II</li> </ul>
Terbutryn	Synonym: $N^2$ - <i>tert</i> -Butyl- $N^4$ -ethyl-6-methylthio-1,3,5-triazin-2,4-diamin  $C_{10}H_{19}N_5S$ MM 241,35 g/mol CAS: 886-50-0	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Herbizid</li> <li>• auch Einsatz gegen Algen u. Wasserpflanzen in Wasserstraßen, Reservoirs u. Fischteichen</li> <li>• Photosynthese-Hemmer am Photosystem II</li> </ul>
Tetrabutylharnstoff	Synonym: 1,1,3,3-Tetrabutylurea  $C_{17}H_{36}N_2O$ MM 284,5 g/mol CAS: 4559-86-8	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Herkunft BASF</li> </ul>
Tetramethylbenzole	 $C_{10}H_{14}$ MM 134,21 g/mol CAS: 488-23-3 (a) 527-53-7 (b) 95-93-2 (c)	<ul style="list-style-type: none"> <li>• 1,2,3,4-T. u.a. im Steinkohlenteer</li> <li>• 1,2,3,5-T. Erdölbestandteil</li> <li>• 1,2,4,5-T zur organ. Synth. von Polyester, Weichmachern, Kunstharzen usw.</li> </ul>

Substanz	Stoffdaten	Verwendung
Toluidin	 <p>o-T.                      m-T.                      p-T.</p> <p><math>C_7H_9N</math> MM 107,15 g/mol CAS: 95-53-4 (o-T.) 108-44-1 (m-T.) 106-49-0 (p-T.)</p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Herst. von Farbstoffen, Vulkanisationsbeschleunigern, Textilhilfsmitteln</li> <li>• starke Blutgifte</li> </ul>
Tonalide (AHTN)	<p>Synonym: 7-Acetyl-1,1,3,4,4,6-hexamethyltetralin</p>  <p><math>C_{18}H_{26}O</math> MM 258,40 g/mol CAS: 1506-02-1</p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Duftstoff in Wasch- und Reinigungsmitteln, Körperpflegemitteln sowie in Nahrungsmitteln, Genusswaren, Papier und Textilien</li> </ul>
Tributylphosphat	 <p><math>C_{12}H_{27}O_4P</math> MM 266,32 g/mol</p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• als Weichmacher für Celluloid, Nitrocellulose-Lacke u. Kunststoffe</li> <li>• als Extraktionsmittel bei der Isolierung von Seltenerdmetallen</li> <li>• bei der Aufarbeitung von Kernbrennstoffen</li> <li>• Flammenschutzmittel</li> <li>• Eintrag u.a. aus Kläranlagen u. Bau- u. Abrisstätigkeiten</li> <li>• Eliminierungsrate der nichthalogениerten Organophosphate in Kläranlagen bis zu 90% möglich</li> </ul>
Triethylcitrat	$\begin{array}{c} H_2C - COOC_2H_5 \\   \\ HO - C - COOC_2H_5 \\   \\ H_2C - COOC_2H_5 \end{array}$ <p><math>C_{12}H_{20}O_7</math> MM 276,29 g/mol CAS: 77-93-0</p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• als Lsm. od. Trägerstoff für Aromen zugelassen</li> <li>• Zusatzstoff bei der Herst. von Trockeneislar</li> <li>• in Kosmetika in Desodoranten u. Intimsprays verwendet</li> <li>• Weichmacher in Kunststoffen mit Lebensmittelkontakt eingesetzt</li> </ul>

Substanz	Stoffdaten	Verwendung
Trimethylbenzole	 <p> <math>C_9H_{12}</math>            MM 120,19 g/mol            CAS:            25551-13-7            95-63-6 (a)            108-67-8 (b)            526-73-8 (c)         </p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• im Steinkohlenteer u. im rohen Erdöl vorkommend</li> <li>• 1,2,4-T: Zwischenprodukt für organ. Synth., zur Herst. von Arzneimitteln, Farbstoffen</li> <li>• 1,2,3-T: Zwischenprodukt für Riechstoffsynthese</li> </ul>
Triphenylphosphat (TPP)	 <p> <math>C_{18}H_{15}O_4P</math>            MM 326,29 g/mol            CAS: 115-86-6         </p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Weichmacher</li> <li>• Flammschutzmittel</li> <li>• Eintrag u.a. aus Kläranlagen u. Bau- u. Abrisstätigkeiten</li> <li>• Eliminierungsrate der nichthalogениerten Organophosphate in Kläranlagen bis zu 90% möglich</li> <li>• WGK 2</li> </ul>
Triphenylphosphin	 <p> <math>C_{18}H_{15}P</math>            MM 262,28 g/mol            CAS: 603-35-0         </p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• vielseitig verwendetes Reagenz in der organ. Chemie</li> <li>• Ausgangsstoff für die Herst. der Phosphor-Ylide</li> <li>• Stabilisator u. Inhibitor von Peroxiden u.a. Oxiden</li> </ul>
Triphenylphosphinsulfid	 <p> <math>C_{18}H_{15}PS</math>            MM 294,36 g/mol            CAS: 3878-45-3         </p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• WGK 3</li> </ul>

Substanz	Stoffdaten	Verwendung
Tris-(2-chlorethyl)-phosphat (TCEP)	$\text{Cl}-\text{H}_2\text{C}-\text{H}_2\text{C}-\text{O}-\text{P}(\text{O})(\text{O}-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{Cl})_2$ <p>C<sub>6</sub>H<sub>12</sub>Cl<sub>3</sub>O<sub>4</sub>P MM 284 g/mol CAS: 115-96-8</p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Flammschutzmittel hauptsächlich in Polyurethanschäumen</li> <li>• Eintrag u.a. aus Kläranlagen u. Bau- u. Abrisstätigkeiten</li> <li>• kaum Abbau von halogenierten Organophosphate in Kläranlagen</li> <li>• WGK 3</li> </ul>
Tris(2-chlorpropyl)phosphat (TCPP)		<ul style="list-style-type: none"> <li>• Flammschutzmittel hauptsächlich in Polyurethanschäumen</li> <li>• Eintrag u.a. aus Kläranlagen u. Bau- u. Abrisstätigkeiten</li> <li>• kaum Abbau von halogenierten Organophosphaten in Kläranlagen</li> </ul>
Verapamil	<p>Synonym: 5-[N-(3,4-Dimethoxyphenethyl)-N-methylamino]-2-(3,4-dimethoxyphenyl)-2-isopropylvaleronitril</p>  <p>C<sub>27</sub>H<sub>38</sub>N<sub>2</sub>O<sub>4</sub> MM 454,59 g/mol CAS: 52-53-9 (V.) 152-11-4 (Hydrochlorid)</p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Calcium Antagonist</li> <li>• Generikum</li> </ul>
Vinclozolin	 <p>C<sub>12</sub>H<sub>9</sub>Cl<sub>2</sub>NO<sub>3</sub> MM 286,11 g/mol CAS: 50471-44-8</p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Fungizid</li> </ul>

