

BRANDSCHUTZ- FORSCHUNG

DER BUNDESLÄNDER

BERICHTE

Untersuchung der Löschverfahren und Löschmittel
zur Bekämpfung von Bränden gefährlicher Güter:
Bewertung von Adsorptionsmaterialien für die GC/
MS-Analyse von Pflanzenschutzmittel-Brandgasen

103

ARBEITSGEMEINSCHAFT DER INNENMINISTERIEN DER BUNDESLÄNDER
ARBEITSKREIS V – AUSSCHUSS FÜR FEUERWEHRANGELEGENHEITEN

Arbeitsgemeinschaft der Innenministerien der Bundesländer
Arbeitskreis V — Ausschuß für Feuerwehrangelegenheiten

Forschungsbericht Nr. 103

**Untersuchung der Löschverfahren und
Löschmittel zur Bekämpfung von Bränden
gefährlicher Güter: Bewertung von Ad-
sorptionsmaterialien für die GC/MS-Ana-
lyse von Pflanzenschutzmittel-Brandgasen**

von

Dipl.-Ing. C. Axel Föhl,
Dipl.-Ing. (FH) Peter Basmer
und Dirk Wagner

Forschungsstelle für Brandschutztechnik
an der Universität Karlsruhe (TH)

Karlsruhe
Dezember 1996

BERICHTS-KENNBLETT

Nummer des Berichtes: <div style="text-align: center; font-size: 1.2em;">103</div>	Titel des Berichtes: Untersuchung der Löschverfahren und Löschmittel zur Bekämpfung von Bränden gefährlicher Güter: Bewertung von Adsorptionsmaterialien für die GC/MS-Analyse von Pflanzenschutzmittel-Brandgasen	ISSN: <div style="text-align: center; font-size: 1.2em;">0170-0060</div>	
Autoren: <div style="text-align: center;"> Dipl.-Ing. C. Axel Föhl, Dipl.-Ing. (FH) Peter Basmer und Dirk Wagner </div>	durchführende Institution: Forschungsstelle für Brandschutztechnik an der Universität Karlsruhe (TH) Hertzstraße 16 D-76187 Karlsruhe		
Nummer des Auftrages: <div style="text-align: center; font-size: 1.2em;">156 (3/95)</div>	auftraggebende Institution: Arbeitsgemeinschaft der Innenministerien der Bundesländer, Arbeitskreis V — Ausschuß für Feuerwehrangelegenheiten		
Datum des Berichtes: <div style="text-align: center; font-size: 1.2em;">Dezember 1996</div>			
Seitenzahl: <div style="text-align: center; font-size: 1.2em;">157</div>	Bilder: <div style="text-align: center; font-size: 1.2em;">38</div>	Tabellen: <div style="text-align: center; font-size: 1.2em;">43</div>	Literaturverweise: <div style="text-align: center; font-size: 1.2em;">28</div>
Kurzfassung: <p>Für die Analysen von Brandgasen verfügt die Forschungsstelle für Brandschutztechnik (FFB) über eine Gerätekombination aus Gaschromatograph und Massenspektrometer (GC/MS). Brandgaskomponenten in sehr geringer Konzentration müssen auf einem Adsorptionsmaterial angereichert werden. Die Brandgase bestehen aus bis zu 70 unterschiedlichen Komponenten, die nicht von einem Adsorbens allein gebunden und effizient wieder abgegeben werden können. Die Adsorptionsröhrchen sind deshalb mit verschiedenen Adsorbentien gepackt. Für die experimentelle Bestimmung der Adsorptionsgüte werden in mehreren Brandversuchen mit Pflanzenschutzmitteln (PSM) jeweils drei Adsorptionsröhrchen parallel beladen und anschließend analysiert. Nach der ersten Versuchsreihe im kg-Maßstab werden neue Adsorbentien-Kombinationen zusammengestellt. Nach Abschluß der Versuche läßt sich aus den Ergebnissen der Rauchgasanalysen eine Empfehlung zur Verwendung des Röhrchens W.3 ableiten. Da die Sammeleffizienz der Probenahme-Röhrchen auch vom Probenvolumen und von der Durchflußrate abhängt, muß für quantitative Messungen der Einfluß dieser Parameter noch untersucht werden, ebenso wie die Verwendung von Glasfritten oder Rußfiltern. Die Abschätzung der Konzentration der einzelnen Brandgaskomponenten ist wegen notwendiger Vereinfachungen sehr ungenau. Allerdings ist die beschriebene Methode momentan die einzige Möglichkeit, um bei schnell benötigten Analysen zumindest die Größenordnung der Konzentrationen zu treffen und um zu entscheiden, welche Mittel zur Gefahrenabwehr eingesetzt werden müssen, wenn man sich im MAK- oder ETW-Konzentrationsbereich befindet.</p>			
Schlagwörter: Adsorption, Adsorptions-Isotherme, GC/MS-Analyse, Konzentrations-Abschätzung, Massenspektren-Identifikation, Multi-Bett-Adsorptionsröhrchen, Pflanzenschutzmittel-Brandversuche, Probenahme, Retentionszeit, Ruß			

INHALTSVERZEICHNIS

1.	EINLEITUNG	1
2.	GRUNDLAGEN DER ADSORPTION	2
2.1	Allgemeines	2
2.2	LANGMUIR-Isotherme	4
2.3	BET-Isotherme	5
2.4	Adsorption von PSM-Brandgasen	6
3.	VERWENDETE ADSORPTIONSMITTEL	7
3.1	Tenax-TA	7
3.2	Graphitisierter Kohlenstoff	8
3.3	Kohlenstoff-Molekularsiebe	8
3.4	Eingesetzte Adsorptionsröhrchen	8
3.4.1	Tenax-TA-Röhrchen	9
3.4.2	Handelsübliche Multi-Bett-Adsorptionsröhrchen	9
3.4.3	Eigene Adsorbentien-Kombinationen	10
4.	GERÄTEBESCHREIBUNG DES GC/MS	11
4.1	Beschreibung des Desorbers	11
4.2	Beschreibung des Gaschromatographen	12
4.3	Beschreibung des Ion-Trap-Detectors™	14
5.	VERSUCHSBESCHREIBUNGEN	16
5.1	Laborversuche	16
5.1.1	Vorversuche	16
5.1.2	Brandversuche	17
5.2	Versuche in der Brandhalle	19
5.2.1	Versuchsaufbau	20
5.2.2	Versuchsdurchführungen	21
5.2.3	Fazit der beiden Versuchsreihen	33
6.	KONZENTRATIONSBERECHNUNG	36
6.1	Externer Standard	36
6.2	Interner Standard	37
6.3	Konzentrations-Abschätzung	38
6.4	Fehlerabschätzung	40
6.5	Vergleich der Brandgaskonzentrationen zwischen Holz und PSM	41
7.	ZUSAMMENFASSUNG UND AUSBLICK	41
8.	LITERATURVERZEICHNIS	44
9.	BILDER UND TABELLEN	46

VERWENDETE FORMELZEICHEN

Kürzel	Bedeutung	Dimension
A_i	Peakfläche der Komponente i	[-]
A_{St}	Peakfläche des internen Standards	[-]
c_i	Konzentration der Probenkomponente i	[mg/m ³]
E_{ad}	Adsorptionsenthalpie	[J]
E_k	Kondensationsenthalpie	[J]
F	Bindungskraft	[N]
F_{Ri}	Responsefaktor der Komponente i	[mg]
$F_{Ra,i}$	absoluter Responsefaktor der Komponente i	[mg]
$F_{Rr,i}$	relativer Responsefaktor der Komponente i	[mg]
K_{ad}	Adsorptionskonstante	[m ² /(N·sec)]
K_{de}	Desorptionskonstante	[sec ⁻¹]
λ	Luftzahl	[-]
m_i	Masse der Brandgaskomponente i	[mg]
n_∞	Anzahl der vorhandenen Adsorptionsplätze	[-]
p	Gasdruck der zu adsorbierenden Substanz	[Pa]
p_D	Dampfdruck der zu adsorbierenden Substanz	[Pa]
R	allgemeine Gaskonstante	[J/(mol·°K)]
r	Molekülabstand	[m]
ϑ	Bedeckungsgrad	[-]
T	Temperatur	[°K]
t	Zeit	[sec]
t_R	Retentionszeit	[sec]
V_P	Volumen der genommenen Rauchgasprobe	[m ³]
v_{ad}	Adsorptionsgeschwindigkeit	[sec ⁻¹]
v_{de}	Desorptionsgeschwindigkeit	[sec ⁻¹]
y_i	Peakintensität	[-]
Z_F	Anzahl der Freiheitsgrade des Systems	[-]
Z_K	Anzahl der Komponenten des Systems	[-]
Z_P	Anzahl der Phasen des Systems	[-]

1. EINLEITUNG

Bei einem Pflanzenschutzmittelbrand besteht nicht nur die Gefahr der Gewässerverunreinigung, auch die Umgebungsatmosphäre kann durch die Brandgase in hohem Maße kontaminiert werden. So mußten beispielsweise 1990 bei einem Lagerhausbrand in Stockerau (Österreich) zehn Feuerwehrleute nach Kontakt mit Rauchgasen wegen Hautreizungen, Atembeschwerden und Brechreiz ins Krankenhaus eingeliefert und die Bevölkerung mit Lautsprecherdurchsagen vor der Gefahr gewarnt werden [1].

Das Gefahrenpotential von Pflanzenschutzmitteln (PSM) wird durch die großen Mengen erhöht, in denen sie produziert, transportiert und gelagert werden. 1994 wurden in der Bundesrepublik über 97.000 t Pflanzenschutzmittelwirkstoff produziert und weitere 21.000 t Wirkstoff importiert [2]. Da mit diesen Mengenangaben Füllstoffe, Dispergiermittel, Lösungsmittel,... noch nicht erfaßt sind, dürfte die transportierte und gelagerte gebrauchsfertige Produktmenge bei über 150.000 t gelegen haben. Weil der Gesetzgeber in der 12. Verordnung zum Bundesimmissionsschutzgesetz (Störfallverordnung) bei Lagern mit mehr als 100 t PSM eine Sicherheitsanalyse vorschreibt [3], wurde von der Industrie eine entsprechende Leitlinie zum Brandschutz in Pflanzenschutzmittellagern herausgegeben [4].

Trotz dieser Sicherheitsanalysen und einiger von der Industrie bereits durchgeführter Brandversuche ist über die genaue Zusammensetzung der Brandgase noch wenig bekannt [5...7]. Deshalb ist es erforderlich, das Brandverhalten von PSM, ihre Verbrennungsprodukte und die Wirkung verschiedener Löschmittel zu untersuchen, um die von PSM-Bränden ausgehende Gefahr abschätzen zu können.

Um Analysen von Brandgasen durchführen zu können, verfügt die Forschungsstelle für Brandschutztechnik (FFB) über eine Gerätekombination aus Gaschromatograph und Massenspektrometer (GC/MS). Brandgaskomponenten in sehr geringer Konzentration müssen auf einem Adsorptionsmaterial angereichert werden, bevor das GC/MS in der Lage ist, sie detektieren zu können. Die Adsorptionsmaterialien befinden sich in unterschiedlichen Zusammenstellungen in gläsernen Probenahme-Röhrchen. Ihre Auswahl und

Zusammenstellung soll im Rahmen dieses Forschungsauftrages bewertet werden, wobei ausschließlich solche in Betracht gezogen werden, die sich bereits bei GC/MS-Analysen bewährt haben.

Für die Versuche werden fünf handelsübliche Pflanzenschutzmittel in Pulver- beziehungsweise Granulatform verwendet. Ihre Charakteristika sind in Tabelle 1 zusammengestellt. Die Angaben beruhen auf Herstellerangaben, genauere Daten liegen allerdings nur für die Wirkstoffe, nicht für die sonstigen Inhaltsstoffe vor [8]. Die benutzten Produkt-Bezeichnungen stellen eingetragene Warenzeichen dar, worauf im weiteren nicht mehr gesondert hingewiesen wird.

2. GRUNDLAGEN DER ADSORPTION

2.1 Allgemeines

Wenn Gase, Dämpfe oder in Flüssigkeiten gelöste Stoffe an einer festen Oberfläche festgehalten werden, so spricht man von Adsorption. Die adsorbierte Substanz heißt Adsorbat, den noch zu adsorbierenden Anteil nennt man Adsorptiv. Der Feststoff, an den sich das Adsorptiv anlagert, heißt Adsorbens. Der umgekehrte Fall, also die Trennung von Adsorbat und Adsorbens, ist die Desorption. In Abhängigkeit von der Bindungsenergie unterscheidet man zwei Arten der Adsorption: die physikalische Adsorption (Physisorption) und die chemische Adsorption (Chemisorption).

Bei der eigentlichen oder physikalischen Adsorption, die nur auf Adhäsion beruht, nicht auf chemischer Bindung, wird das Adsorbat durch VAN-DER-WAALS-Kräfte, das heißt durch Dipol- und Dispersionskräfte an das Adsorbens gebunden. Diese Kräfte sind vergleichsweise schwach und deshalb ist die Physisorption ein reversibler Vorgang. Obwohl die VAN-DER-WAALSSchen Bindungskräfte F mit zunehmendem Molekül-
abstand r

$$F \sim \frac{1}{r^n} \quad \text{mit } 2 \leq n \leq 7 \quad (1)$$

rasch abnehmen, wirken sie doch über relativ große Entfernungen (Bereich mehrerer Moleküldurchmesser) und können somit auf dem Adsorbens eine mehrmolekulare Schicht aufbauen. Die Energie, die bei der Physisorption frei wird, liegt in der Größenordnung der Kondensationsenthalpie des Adsorptivs (etwa -20 kJ/mol). Diese Energie reicht in der Regel nicht aus, um Molekülbindungen aufzubrechen.

Bei der Chemisorption dagegen entwickeln sich zwischen Adsorbat und Adsorbens chemische Bindungen. Deren Bindungskraft ist zwar wesentlich stärker als VAN-DER-WAALS-Kräfte, nimmt jedoch mit der Entfernung schneller ab: $10 < n < 13$. Ihre geringere Reichweite bewirkt, daß bei der Chemisorption lediglich eine monomolekulare Schicht aufgebaut wird. Die Enthalpie, die hierbei frei wird, liegt etwa um einen Faktor 10 höher als bei der Physisorption (-180 kJ/mol bis -280 kJ/mol). Da es sich bei der Chemisorption meist um eine kovalente Bindung handelt, ist sie überwiegend irreversibel. Der Übergang von chemischer zu physikalischer Adsorption ist fließend, in vielen Fällen ist eine Zuordnung nicht eindeutig möglich.

Der Anteil der Adsorbens-Oberfläche, der mit adsorbierten Teilchen belegt ist, beziehungsweise das Verhältnis der besetzten zu den insgesamt vorhandenen Adsorptionsplätzen wird Belegungs- oder Bedeckungsgrad ϑ genannt. Seine zeitliche Änderung ist die Adsorptionsgeschwindigkeit v_{ad} :

$$v_{ad} = \dot{\vartheta} \quad (2)$$

Um den Adsorptionsvorgang quantitativ beschreiben zu können, muß die Abhängigkeit des Bedeckungsgrades ϑ von den thermodynamischen Randbedingungen Druck und Temperatur bekannt sein. Unter der Voraussetzung, daß zwischen Adsorption und Desorption ein dynamisches Gleichgewicht besteht und daß chemische Reaktionen in diesem System nicht stattfinden, gilt die GIBBSsche Phasenregel,

$$Z_F = Z_K - Z_P + 2 \quad (3)$$

mit der sich die Anzahl der Freiheitsgrade Z_F , das heißt der unabhängigen Variablen eines Systems, aus der Anzahl seiner Komponenten Z_K und der Anzahl der in ihm enthaltenen Phasen Z_P dieser Komponenten berechnen läßt.

Bei der Adsorption eines reinen Gases an eine feste Oberfläche besteht das System aus zwei Komponenten (Adsorptiv und Adsorbens) und zwei Phasen (fluid und fest) und verfügt nach Gleichung (3) also nur über 2 unabhängige Variable: Druck p und Temperatur T . Von diesen beiden werden alle anderen physikalischen Dimensionen des Systems, so auch der Bedeckungsgrad, bestimmt. Besteht das Adsorptiv aus einem Gasgemisch, so erhöht sich für jede weitere Komponente der Freiheitsgrad um 1 und anstelle des Gesamtdruckes p ist der Partialdruck der jeweiligen Komponente einzusetzen.

Die Abhängigkeit des Bedeckungsgrades bei konstanter Temperatur vom Druck — oder von einem Partialdruck in Mehrkomponentensystemen — wird als Adsorptionsisotherme bezeichnet. Diese Darstellung entspricht den häufigsten Anwendungen der Adsorption. So verläuft beispielsweise die Rauchgasreinigung bei nahezu konstanter Temperatur, während der Partialdruck der zu entfernenden Komponente zielgemäß im Verlauf der Reinigung abnimmt.

Um die Adsorption physikalisch/mathematisch zu beschreiben, finden sich in der Literatur verschiedene Ansätze, die in entsprechend unterschiedlichen Modell-Isothermen resultieren. Insbesondere mit den Möglichkeiten der Datenverarbeitung wird derzeit versucht, numerische Modelle von Mehrkomponentensystemen zu berechnen, wobei allerdings häufig noch mit empirisch ermittelten Beziehungen gearbeitet wird [9...13]. Die beiden bekanntesten Isothermen-Modelle stammen von LANGMUIR und von BRUNAUER, EMMET und TELLER.

2.2 Die LANGMUIR-Isotherme

Die Bestimmung des Bedeckungsgrades als Funktion des Druckes setzt nach LANGMUIR voraus [12], daß

- die Adsorption eine stetige Funktion des Druckes ist, das heißt, daß sie nicht stufenweise verläuft,
- keine mehrmolekularen Schichten gebildet werden,

- alle besetzbaren Adsorptionsplätze energetisch gleichwertig sind,
- zwischen adsorbierten Teilchen keine Wechselwirkungen bestehen,
- die adsorbierten Teilchen lokalisiert sind, sich also auf dem Adsorbens nicht bewegen und daß
- das Adsorptiv ein ideales Gas ist.

Im Gleichgewicht zwischen Adsorption und Desorption gilt:

$$v_{ad} = v_{de} \quad (4)$$

und

$$v_{ad} = K_{ad} \cdot p \cdot n_{\infty} \cdot (1-\vartheta) \quad (5)$$

wobei n_{∞} für die Gesamtzahl aller vorhandenen Adsorptionsplätze steht. Für die Desorption gilt

$$v_{de} = K_{de} \cdot n_{\infty} \cdot \vartheta \quad (6)$$

Setzt man nun die beiden Geschwindigkeitsgleichungen in die Gleichgewichtsbedingung ein und ersetzt K_{ad}/K_{de} durch die Konstante K , so erhält man die Gleichung der LANGMUIR-Isotherme,

$$\vartheta = \frac{K \cdot p}{1 + K \cdot p} \quad (7)$$

die sich für große Drücke asymptotisch der 1 nähert, die Oberfläche wird also gesättigt. Bei kleinen Drücken geht die Isotherme in die Ursprungsgerade mit der Steigung K über (Bild 1), womit die realen Verhältnisse bei der Adsorption stark idealisiert werden.

2.3 Die BET-Isotherme

Das Modell der Isotherme von BRUNAUER, EMMET und TELLER (BET) berücksichtigt den Übergang zur Kapillarkondensation und daß bei der Adsorption auch mehrmolekulare Schichten gebildet werden können [13]. Die Adsorptionsenergie der ersten adsorbierten Schicht hat den Wert E_{ad} , die folgenden Schichten haben als Adsorptionsenergie die Kondensationsenthalpie E_k , da ein Molekül der zweiten Schicht sich nicht an das Adsorbens, sondern an ein ihm gleichendes Molekül anlagert. Die Gleichung der BET-Isothermen lautet

$$\vartheta = \frac{p}{p - p_D - c \cdot p} \cdot \frac{c \cdot p_D}{p - p_D} \quad \text{mit } c = e^{\frac{E_{ad} - E_k}{R \cdot T}} \quad (8)$$

Die BET-Isotherme hat keine Asymptote, es lagert sich Schicht auf Schicht des Adsorbates. In der Regel reichen die Bindungskräfte aber nicht für beliebig viele Schichten, ab einer bestimmten Schichtdicke werden keine Moleküle mehr adsorbiert (Bild 1).

2.4 Adsorption von PSM-Brandgasen

Im Rahmen dieses Forschungsauftrages sollen Adsorptionsmaterialien unter Einsatzbedingungen (Probenahme während eines Realbrandes) getestet werden. Die Adsorptionsverhältnisse unter diesen Bedingungen lassen sich mit den Modellen von LANGMUIR und BET nicht in Einklang bringen: Die Brandgase bestehen aus bis zu 70 unterschiedlichen Komponenten unbekannter Zusammensetzung, die nicht von einem Adsorbens allein gebunden und effizient wieder abgegeben werden können. Die Adsorptionsröhrchen sind deshalb mit verschiedenen Adsorbentien gepackt, die es erlauben, mit einer einzigen Probenahme eine größere Zahl von Rauchgasbestandteilen zu analysieren. Während der Probenahme änderte sich auch die Zusammensetzung des Brandgases und die Temperatur, so daß von einer Isothermen nicht gesprochen werden kann. Zusätzlich sind die Brandgase mit Rußpartikeln beladen, deren Einfluß auf die Untersuchungsergebnisse hier nicht berücksichtigt werden kann.

Da weder ein theoretisches Modell noch ein empirisches Berechnungsverfahren existiert, um unter diesen Bedingungen den Bedeckungsgrad des Adsorbens zu bestimmen, kann die Adsorptionsgüte verschiedener Probenahme-Röhrchen für die Analyse von Rauchgasen nur experimentell bewertet werden. Hierfür werden in mehreren Versuchen mit PSM-Bränden jeweils drei Adsorptionsröhrchen parallel beladen und anschließend mit dem GC/MS-Gerät analysiert.

3. VERWENDETE ADSORPTIONSMITTEL

In den verwendeten Glas-Adsorptionsröhrchen befinden sich 5 handelsübliche Adsorptionsmittel meist als Kombination verschiedener Betten. Auf großtechnisch eingesetzte Adsorbentien, wie beispielsweise Aktivkohle, wird verzichtet, da bereits im Vorfeld der Arbeit klar war, daß deren Leistungsfähigkeit geringer als die von Analysenadsorbentien zu bewerten ist. Die Beschreibung der verwendeten Adsorptionsmittel ist in Tabelle 2 zusammengestellt, sie basiert auf Herstellerangaben [14]. Die Angabe der Partikelgröße [mesh] bezieht sich auf eine Siebanalyse, bei der die Zahl der Maschen/Zoll als Unterscheidungskriterium für die beim Sieben zu trennenden Fraktionen verwendet wird. Da zum einen die Siebgewebe aus Drähten unterschiedlicher Stärke bestehen, kann die Maschenzahl nicht direkt in Partikeldurchmesser umgerechnet werden. Und da zum anderen die zu siebenden Partikel im allgemeinen keine Kugelform besitzen, wird die Feinheit eines Siebes nicht mit einer Einzelangabe, sondern mit einem Größenbereich bezeichnet. Die Größe der aktiven inneren Oberfläche hängt ausschließlich von der Mikrostruktur der Partikel ab, nicht von deren Durchmesser. Die Bezeichnungen Tenax-TA, Carbotrap-300, Carbotrap-400, Carboxen-569, Carbosieve-SIII, Carbotrap-B, -C und -F sind eingetragene Warenzeichen.

3.1 Tenax-TA

Tenax-TA, ein weißes Granulat, ist ein poröses Polymer auf der Grundlage von Dibenzofuran [132-64-9]. Es ist bis 350 °C einsetzbar und hat eine geringe Affinität zu Wasser. Es soll überwiegend flüchtige und halbflüchtige Verbindungen adsorbieren, das heißt Moleküle der Größenordnung C₅ bis C₁₂ [14].

3.2 Graphitisierter Kohlenstoff

Bei den Adsorbentien aus graphitisierendem Kohlenstoff handelt es sich um nicht-poröse Materialien, die nicht mit Aktivkohle zu verwechseln sind. Da sie bei über 2000 °C hergestellt werden, sind sie problemlos bis 400 °C einsetzbar. Die auftretenden Wechselwirkungen an der Oberfläche beruhen ausschließlich auf LONDON-Kräften, die durch induzierte Dipole hervorgerufen werden. Wegen ihrer hydrophoben Oberfläche liegt eine geringe Affinität zu Wasser vor.

3.3 Kohlenstoff-Molekularsiebe

Molekularsiebe dienen hauptsächlich zum Adsorbieren kleiner Moleküle. Hergestellt werden diese, indem Polymeren pyrolysiert werden, von denen nach der Pyrolyse lediglich das Kohlenstoffgerüst bleibt. Auf Grund ihres Herstellungsverfahrens halten die Adsorbentien Temperaturen von 400 °C ohne Schäden aus. Wegen ihrer hohen Hydrophobie sind sie sehr gut geeignet zur Probenahme bei hoher Feuchtigkeit. Die Größe und Form der Poren des Adsorbens entscheiden sowohl über die Effizienz der Adsorption als auch der Desorption.

3.4 Eingesetzte Adsorptionsröhrchen

Für die in den Versuchen eingesetzten Adsorptionsröhrchen werden vom Hersteller speziell gereinigte und silanisierte Glasröhrchen verwendet. Mit dem Begriff silanisieren wird ein Verfahren bezeichnet, das Glas in Bezug auf Adsorptions- und Desorptionsvorgänge passiviert, damit das Glas nicht selbst als Adsorptionsmittel wirkt. Die Glasröhrchen haben einen Innendurchmesser von 4 mm, einen Außendurchmesser von 6 mm und eine Länge von 150 mm. Die Außenabmessungen der Röhrchen sind durch die Abmessungen des Aufnehmers am GC/MS-Gerät vorgegeben und können nicht verändert werden. Der innere Aufbau, die verwendeten Adsorptionsmaterialien und deren Masse

sind in den Bildern 2 und 3 dargestellt. Insgesamt werden sechs verschiedene Adsorptionsröhrchen eingesetzt.

3.4.1 Tenax-TA-Röhrchen

In einem an der TU Hamburg-Harburg (TUHH) durchgeführten Langzeit-Feldversuch werden in realen Einsatzfällen Brandgasproben von Feuerwehren aufgenommen und an die TUHH zur Auswertung geschickt. In diesem Feldversuch werden meist Tenax-TA-Röhrchen verwendet [15]. Um ein Bild von der Qualität dieses Materials zu gewinnen, wird an der FFB als einziges Monobetröhrchen ebenfalls Tenax-TA eingesetzt. Um Ruß und sonstige Schwebeteilchen vom Adsorptionsmaterial fernzuhalten, ist das Röhrchen am Eingang mit einer Glasfritte als Filter ausgestattet.

3.4.2 Handelsübliche Multi-Bett-Adsorptionsröhrchen

Da ein einzelnes Adsorbens nicht in der Lage ist, alle Verbindungen aufzufangen und effizient wieder abzugeben, werden in der Praxis Adsorptionsröhrchen mit mehreren Adsorbentien gepackt, die quasi als Reihenschaltung in einem Röhrchen angeordnet sind. So können Verbindungen aus einem größeren Bereich mit einer einzigen Probenahme analysiert werden. Die Multi-Bett-Adsorptionsröhrchen sind grundsätzlich so aufgebaut, daß die Stärke der Adsorbentien in Beladungsrichtung zunimmt. Die großen, leicht adsorbierbaren Moleküle müssen möglichst bereits am Anfang aufgefangen werden, um zu verhindern, daß sie mit starken Adsorbentien in Berührung kommen, von denen sie irreversibel festgehalten würden. Insbesondere die Molekularsiebe mit ihrer sehr aktiven Oberfläche würden damit völlig unbrauchbar werden. Bei der Desorption wird die Durchströmungsrichtung umgekehrt.

3.4.2.1 Carbotrap-300

Wie in Bild 2 zu sehen ist, durchströmt das Brandgas zuerst das Carbotrap-C- und anschließend das Carbotrap-B-Bett, zuletzt das Carbosieve-III-Bett. Das Adsorptionsröhrchen ist nicht mit einer Glasfritte ausgestattet, sondern verfügt nur über silanisierte Glaswolle an beiden Enden. Diese dient dabei in erster Linie dazu, die Sorbentien im Rohr festzuhalten und nicht als Filter für Schwebeteilchen. Diese Adsorbentien-Kombination ist geeignet, um Moleküle ab der Größenordnung C_2 zu adsorbieren.

3.4.2.2 Carbotrap-400

Der Vorteil des Carbotrap-400-Röhrchens gegenüber einem Carbotrap-300-Röhrchen besteht einerseits im Einsatz einer Glasfritte und andererseits in der Verwendung von Carbotrap-F, das im Bereich der großen Moleküle eine bessere Adsorption verspricht.

3.4.3 Eigene Adsorbentien-Kombinationen

Nach der ersten Versuchsreihe in der Brandversuchshalle im kg-Maßstab werden neue Adsorbentien-Kombinationen zusammengestellt, um die Adsorptions- und Desorptionsfähigkeit zu verbessern. Die Begründungen für die gewählten Kombinationen werden in Kapitel 5.2.2.2 beschrieben.

3.4.3.1 Adsorptionsröhrchen W.1

Beim Typ W.1 (Bild 3) handelt es sich um ein verändertes Carbotrap-300-Adsorptionsröhrchen. Die Masse an Carbotrap-C wird von 300 mg auf 150 mg herabgesetzt. Das Adsorptionsmittel Carbotrap-B wird durch Tenax-TA ersetzt. Damit ergibt sich allerdings eine Beschränkung des Temperaturbereiches bei der Desorption, da Tenax-TA nur bis maximal 350 °C eingesetzt werden kann.

3.4.3.2 Adsorptionsröhrchen W.2

Mit dem Typ W.2 wird ein Multi-Bett-Adsorptionsröhrchen mit fünf Betten zusammengestellt. Die Betten sind überwiegend für kleine Moleküle ausgelegt, weil W.2 insbesondere im Bereich der leichtflüchtigen Komponenten gute Ergebnisse erzielen sollte. Da auch hier Tenax-TA verwendet wird, ergibt sich ebenfalls eine Temperaturbegrenzung bei der Desorption auf 350 °C.

3.4.3.3 Adsorptionsröhrchen W.3

Das Röhrchen W.3 orientiert sich stark an Carbotrap-400. Wie bei W.1 wird das Adsorbens Carbotrap-B durch 65 mg Tenax-TA ersetzt. Als einziges Röhrchen im Eigenbau verfügt W.3 über Carbotrap-F, um im Bereich höhersiedender Stoffe bessere Ergebnisse zu erreichen.

4. GERÄTEBESCHREIBUNG DES GC/MS

4.1 Beschreibung des Desorbers

Vor der Gaseinlaßstelle des Gaschromatographen befindet sich ein Thermodesorber (Bild 4). Er besteht aus einem beheizbaren Stahlrohr, das die Adsorptionsröhrchen aufnimmt. Wenn der Desorber gasdicht an den Einlaß des GC angeschlossen wird, werden die Röhrchen durch eine Feder fixiert. Das Rohr wird solange beheizt, bis die vorgegebene (maximal mögliche) Temperatur des jeweiligen Röhrchens erreicht ist. Diese beträgt bei Röhrchen mit Tenax-TA 350 °C und bei allen anderen Röhrchen 400 °C. Nach Erreichen dieser Temperatur wird sie für eine Dauer von 120 sec gehalten. Mit der Einstellung einer möglichst hohen Temperatur und einer langen Verweilzeit soll eine vollständige Desorption erreicht werden. Danach werden mit einer Gasspritze 3 ml Stickstoff bei Raumtemperatur zugegeben, um die desorbierten Gase aus dem Adsorptionsröhrchen in die Gasschleife des GC zu spülen.

4.2 Beschreibung des Gaschromatographen

Der Gaschromatograph dient in erster Linie dazu, die Bestandteile des Gasgemisches, welches bei der thermischen Desorption der Adsorptionsröhrchen frei wird, voneinander zu trennen. Seine wichtigsten Bauteile sind Ofen, Gasschleife und Trennsäule. Beim hier verwendeten GC handelt es sich um das Modell GC 8500 der Firma Perkin-Elmer, Überlingen/Bodensee.

Das desorbierte Brandgas wird mit Stickstoff in die Gasschleife gespült. Von dort gelangt das Gasgemisch zu Beginn der Analyse in die Trennsäule, eine mit einer festen Phase ausgekleidete Kapillare. Im Gerät der FFB handelt es sich um eine Dünnschicht-Quarzkapillarsäule von 50 m Länge, einer Schichtstärke von $0,4 \mu\text{m}$ und einem Innendurchmesser von $0,25 \text{ mm}$. Durch diese Säule wird das Gasgemisch mit einem permanenten hochreinen Helium-Trägergasstrom transportiert. Die einzelnen Komponenten werden von der festen Phase in der Säule adsorbiert und wieder freigegeben. Da dieser Vorgang von den NERNSTschen Verteilungskoeffizienten der einzelnen Komponenten abhängt, wandern diese mit unterschiedlichen Geschwindigkeiten durch die Trennsäule [16]. Dieser Effekt kann durch Veränderung der Säulentemperatur beeinflusst werden. Dazu wird die Säule kontinuierlich oder in Temperatursprüngen in einem Ofen aufgeheizt. Bei genügend langer Säule und entsprechendem Temperaturprogramm kann eine sehr gute Trennwirkung erzielt werden.

Die maximale Ofentemperatur von $220 \text{ }^\circ\text{C}$ begrenzt den Meßbereich des Systems nach oben. Das heißt, Stoffe mit einem Siedepunkt von über $220 \text{ }^\circ\text{C}$ können zwar noch qualitativ nachgewiesen werden, wenn sie aufgrund ihres Dampfdrucks nicht vollständig kondensieren, so daß einige Moleküle mit der mobilen Phase zum Detektor transportiert werden, doch sind quantitative Aussagen hier nicht mehr möglich. Bei den durchgeführten Versuchen bildet Naphthalin [91-20-3] die Obergrenze als höchst siedender der quantitativ bestimmbarer Stoffe. Von Rauchgasbestandteilen wie etwa Acenaphthen (1,2-Dihydro-Acenaphthylen) [83-32-9] und Biphenylen [259-79-0] kann nur ihr Vorhandensein detektiert werden. Stoffe, deren Siedepunkt über der Desorber-Temperatur liegt, können auch nicht mehr qualitativ detektiert werden.

Die Zeit, die ein Stoff von der Aufgabestelle bis zum Detektor benötigt, wird Retentionszeit genannt und ist unter anderem von der Säulenlänge abhängig. Nur Retentionszeiten, die bei identischen Analysenparametern (Temperaturverlauf, Säulenlänge und -art) ermittelt werden, sind direkt vergleichbar. Deshalb muß, wenn die Retentionszeit zur Stoffidentifikation herangezogen werden soll, entweder der vermutete Stoff als Reinstoff gemessen und mit der Analyse verglichen werden, oder es bedarf eines zusätzlichen Analysengerätes, wie etwa eines Massenspektrometers. Eine Stoffidentifikation ausschließlich mit der Retentionszeit ist in der Regel nicht möglich [17].

Bild 5 zeigt als Analysenergebnis das Totalionenchromatogramm einer untersuchten Gasprobe. Hier wird ein definiertes Gemisch aus Benzol [71-43-2], Toluol [108-88-3] und *o*-Xylol [95-47-6] (BTX-Standard) analysiert. Auf der Abszisse ist die Retentionszeit in Sekunden und auf der Ordinate die Intensität y des gemessenen elektrischen Impulses aufgetragen. Die Intensität wird als dimensionslose gerätespezifische Größe aufgetragen. Damit sind Intensitäten unterschiedlicher Geräte nicht miteinander vergleichbar. Strömt lediglich das Trägergas, so wird die Nulllinie registriert. Bei Retentionszeiten von 420 sec, 555 sec und 720 sec schlägt die Linie des Chromatogramms zu einem sogenannten Peak aus. Jeder dieser Peaks entspricht einer Substanz. In diesem Fall handelt es sich um die drei Gaskomponenten Benzol, Toluol und *o*-Xylol.

Anhand der Peakfläche kann unter bestimmten Bedingungen eine Aussage über die Konzentration einer Komponente gemacht werden (siehe Kapitel 6). Falls jedoch die Trennsäule ein Gasgemisch nicht vollständig auftrennen kann, kommt es zu Überlappungen von Peaks, die eine Mengenabschätzung sehr schwierig machen. Da nur eine sehr langen GC-Säule mit entsprechend langen Analysenzeiten in der Lage ist, alle im Brandgas vorkommenden Stoffe zu trennen, müssen Abstriche in Kauf genommen werden. So ist die hier eingesetzte Säule nicht in der Lage, Stoffe, die leichtflüchtiger als Luft sind, zu trennen. Damit sind Brandgaskomponenten wie beispielsweise CO, HCN, SO₂, CO₂ und HCl nicht mit dem GC/MS in der vorhandenen Ausstattung zu detektieren.

4.3 Beschreibung des Ion-Trap-Detectors™ (ITD)

Bei der vorgestellten Gerätekombination aus Gaschromatograph (GC) und Massenspektrometer (MS) dient das Massenspektrometer, hier ein Ion-Trap-Detector™ (Bild 6), sowohl als Detektor des Gaschromatographen als auch zur Identifikation der im GC getrennten Komponenten. Hierfür werden die ankommenden Moleküle durch Elektronenbeschuß ionisiert. Der Heizdraht, der diese Elektronen aussendet, wird Filament genannt. Die Energie dieser Ionisationselektronen ist in der Regel so groß, daß die Moleküle nach der Ionisation in mehrere Bruchstücke unterschiedlicher Masse zerfallen. Da gleiche Moleküle bei gleicher Ionisationsenergie immer in die gleichen Bruchstücke zerfallen, kann man bei Kenntnis der Bruchstückmassen und ihrer Verteilung, dem sogenannten Massenspektrum, das Molekül identifizieren. Sehr schwierig ist es allerdings, wenn der vorgeschaltete Gaschromatograph nicht in der Lage war, das Stoffgemisch vollständig aufzutrennen, da Massenspektren nur für Reinstoffe bekannt sind. — Ebenso können mit der Massenspektrometrie unbekannte Verbindungen ionisiert werden, um anhand ihrer Bruchstücke Rückschlüsse auf Struktur und Formel der Verbindungen zu ziehen.

Gelangt nun eine Gaskomponente aus dem GC in den ITD, so werden die Moleküle ionisiert und in ihre charakteristischen Bruchstücke zerlegt. Da Ionen auf elektrische und magnetische Felder mit Anziehung oder Abstoßung reagieren, ist es möglich, mit einer geschickten Anordnung elektromagnetischer Felder alle Ionen in der ITD einzuschließen, ohne daß sie deren Wände berühren. Bei Wandkontakt würden die Ionen neutralisiert und wären dann nicht mehr zu lenken. Während der eigentlichen Analyse, der sogenannten Scanphase, wird das elektrische Feld verändert, indem die angelegte Spannung rampenförmig so gesteigert wird, daß die Ionen je nach Verhältnis von Masse zu Ladung ausgelenkt werden und zu unterschiedlichen Zeiten aus dem Einschlußfeld in den Elektronenvervielfacher gelangen. Die ausgetretenen Ionen durchlaufen hier ein Beschleunigungsfeld und schießen auf eine Anode, aus der sie Sekundärelektronen herausschlagen, die als elektrische Signale gemessen werden. Die elektrischen Signale einer Scanphase werden zur automatischen Auswertung zum Computer geleitet. Dort kann das Massenspektrum einer Substanz abgerufen werden, das sich wie das Chromatogramm des Gasmisches aus verschiedenen Peaks zusammensetzt. So wie die Peaks im Chromato-

gramm die einzelnen Substanzen eines Gemisches repräsentieren, stellen die Peaks im Massenspektrum die Einzelmassen der ionisierten Molekülbruchstücke einer Substanz dar. Beispielsweise zerfällt Benzol bei der Ionisierung in die typischen Aromaten-Bruchstücke mit den Massenzahl-Serien 37...39 und 77...79 (Bild 7).

Um vom Massenspektrum auf den untersuchten Stoff zu schließen, wird das gemessene Massenspektrum mit den gespeicherten Bibliotheksspektren verglichen. Hierzu steht die Spektrenbibliothek des National Institute for Standards and Technology (NIST-Bibliothek) mit etwa 42.000 Spektren zur Verfügung. Daß diese Bibliothek nahezu ausschließlich Spektren von Stoffen enthält, deren Molekulargewicht größer ist als 50 atomaren Masseneinheiten, stellt eine weitere Einschränkung des Meßbereiches dieses Systems dar.

Die Suche nach dem richtigen Vergleichsspektrum kann nach drei verschiedenen Kriterien durchgeführt werden [18]:

- Fit: Das System sucht jene Stoffe aus der Bibliothek, deren Spektren in das Probenpektrum passen (fit) und die dem gesuchten so nahe kommen, daß von ihm möglichst wenige überzählige Massenpeaks verbleiben.
- Rfit: Umgekehrt werden beim reverse fit vom System die Stoffe der Bibliothek genannt, in deren Spektrum das gemessene enthalten ist und die darüber hinaus möglichst wenige weitere Peaks aufweisen.
- Purity: Nach einem vom Hersteller entwickelten Verfahren werden alle Massenpeaks des gemessenen Probenpektrums und der zum Vergleich herangezogenen Bibliotheksspektren gewichtet. Als Identifikationsvorschläge nennt das System jene 10 Substanzen, bei denen hinsichtlich Fit und Rfit die beste Übereinstimmung besteht.

Bei jedem Bibliotheksvorschlag werden Zahlenwerte zwischen 1 und 999 für purity, fit und Rfit als Maß für die Übereinstimmung angegeben. Je höher der Zahlenwert, desto besser die jeweilige Übereinstimmung (Bild 8).

Ein hoher Fit-Wert in Kombination mit einem niedrigen Rfit-Wert zeigt zwar an, daß sich im gemessenen Spektrum der Bibliotheksvorschlag in vollem Umfang wiederfindet,

jedoch deuten zusätzliche Massenpeaks im Probenspektrum, die im Bibliotheksvorschlag fehlen, daraufhin, daß in der Probe eine weitere, vom GC nicht getrennte Substanz, ein Koeluat, enthalten sein könnte.

Unter den 10 vom Rechner ausgeworfenen Identifikationsvorschlägen ist zwar der erste auf Grund seiner hohen Werte wahrscheinlich, aber es ist auch möglich, daß ein Vorschlag mit geringerer Priorität zutrifft. Um sich über einen detektierten Stoff Gewißheit zu verschaffen, bedarf es weiterer Informationen. Hierzu zählen Retentionszeit, Literaturangaben wie Schmelzpunkt, Siedepunkt und Polarität sowie im Idealfall Vergleichsmessungen mit dem Reinstoff der mutmaßlichen Substanz [18].

5. VERSUCHSBESCHREIBUNGEN

5.1 Laborversuche

5.1.1 Vorversuche

5.1.1.1 Brandverhalten

In einem Porzellantiegel ohne zusätzliche Wärmequelle wird zuerst versucht, etwa 1 g des jeweiligen PSM mit einem Streichholz zu zünden. Es zeigt sich, daß diese Wärmemenge nicht ausreicht, um die untersuchten PSM in Brand zu setzen. In Tabelle 3 sind die Reaktionen der einzelnen PSM auf ein Streichholz als Zündquelle zusammengestellt.

In einer zweiten Testreihe werden die PSM in dem Porzellantiegel mit einem 500 W-Elektrobrenner erwärmt. Die Temperatur im Tiegel wird mit einem Thermoelement bei abgeschaltetem Abzug gemessen. Bild 9 zeigt den Versuchsaufbau. Da die Temperatur in einem Granulat bestimmt wird, aus welchem zusätzlich Gase austreten, sind die ermittelten Temperaturen nicht exakt, doch genau genug, um die Zersetzungstemperaturen zu zeigen. Schon bei relativ geringer Temperaturerhöhung treten die in Tabelle 4 zusammengestellten Veränderungen der PSM ein.

5.1.1.2 Zersetzungsprodukte der PSM

Um einen Überblick über die zu erwartenden Zersetzungsprodukte bei Erwärmung unter Luftabschluß zu erhalten, werden die Substanzen in leere Adsorptionsröhrchen gefüllt und in den Desorber des GC/MS-Systems gebracht. Dort werden folgende Bedingungen eingestellt: Temperatur etwa 150 °C, Verweilzeit 120 sec, Spülgas 3 ml Stickstoff. Die GC/MS-Analyse erfolgt nur qualitativ. In Tabelle 5 ist markiert, welche Verschmelzungsprodukte bei welchem PSM detektiert werden. Die Tabelle enthält jeweils den ersten Bibliotheksvorschlag und die Retentionszeit dieser Substanz sowie die Masse des verschmolzenen PSM und die genaue Temperatur.

In einer zweiten Meßreihe bei etwa 200 °C reagieren die PSM zum Teil überaus heftig und machen die Adsorptionsröhrchen durch geschmolzenes und teilzersetztes PSM unbrauchbar. Des weiteren verstopfen die auskondensierten PSM beziehungsweise deren Zersetzungsprodukte die Gasschleife. Tabelle 6 enthält die Analyseergebnisse.

5.1.2 Brandversuche

5.1.2.1 Versuchsaufbau

Wie in Bild 9 befindet sich das PSM in einem Porzellantiegel auf dem 500 W-Elektrobrenner. Die entstehenden Rauchgase werden in einem Glastrichter gesammelt, um bei den kleinen Rauchgasmengen nicht allzuviel Luft mit einzusaugen. Der Glastrichter enthält das Ansaugröhrchen aus Edelstahl und ein Thermoelement, um die Gastemperatur am Eintritt bestimmen zu können. Von dort wird das Rauchgas mit Schlauchleitungen zu einem Teflonfilter mit Durchlaßöffnungen von 45 µm Durchmesser geführt, um Rußpartikel vom nachgeschalteten Adsorptionsröhrchen fernzuhalten. Sowohl das Ansaugrohr als auch die Schlauchleitungen sind mit Teflon-Innenrohren ausgerüstet, um Reaktionen mit der Schlauchoberfläche möglichst zu vermeiden. Nach dem Passieren des Adsorptionsröhrchens wird das Rauchgas zur Messung des Volumenstroms über ein Rotameter geführt, bevor es in den Abzug gepumpt wird.

5.1.2.2 Versuchsdurchführung

In der ersten Versuchsreihe wird jeweils 1 g PSM in den Tiegel gegeben und der Elektrobrenner auf maximale Leistung geschaltet. Insgesamt sollen 0,5 l Gas durch das Adsorptionsröhrchen gezogen werden. Mit einer Einstellung von 0,1 l/min am Rotameter ergibt das eine Pumpenlaufzeit von 5 Minuten. Damit kann bei dieser Substanzmenge der komplette Aufheiz- und Verbrennungsvorgang abgedeckt werden. Bei der starken Verdünnung der Brandgase in der Umgebungsluft erweist sich jedoch die Masse von 1 g PSM als zu gering, um ausreichend starke Peaks zu liefern.

Nach dieser Versuchsreihe wird bei unverändertem Versuchsaufbau die Substanzmenge auf 3 g und der Volumenstrom auf 5 l/min erhöht. Die Pumpenlaufzeit bleibt unverändert. Durch diese Modifizierungen werden die Peaks soweit vergrößert, daß auch bislang in der Nulllinie versteckte Peaks gut zu sehen und zu identifizieren sind. Mit diesen Versuchsbedingungen wird je eine Versuchsreihe aller PSM mit Carbotrap-300, mit Carbotrap-400 und mit Tenax-TA gefahren.

Zwei im Anschluß hieran durchgeführte Einzelversuche, um den Einfluß des Rußfilters auf die Messung bewerten zu können, zeigen, daß bei so geringen Rußströmen keinerlei signifikante Unterschiede in den Meßergebnissen mit und ohne Filter zu erkennen sind. Bei den Vorversuchen hätte man auf den Rußfilter durchaus verzichten können.

5.1.2.3 Versuchsauswertung

Da diese Vorversuche primär der Einarbeitung in die Pflanzenschutzmittel-Rauchgasanalyse dienen, erübrigt sich eine stoffliche und flächenmäßige Auswertung — auch weil auf Grund der hohen Luftvermischung beim Ansaugvorgang eventuelle Unterschiede der Peakfläche nicht ausschließlich auf die Adsorptionsgüte, sondern eher auf die Mischungsinhomogenität infolge von Luftturbulenz zurückzuführen sind. Darüber hinaus sollen die Adsorptionsröhrchen, wie bereits erwähnt, im Realbrandfall getestet werden, dem die Substanzmenge von 3 g in diesen Versuchen sicher nicht entspricht.

Für die PSM Lentagran WP und Rubitox sind in den Bildern 10 und 11 beispielhaft die Chromatogramme wiedergegeben. Betrachtet man diese Chromatogramme, so lassen sich folgende, erste Qualifizierungen festhalten:

- Carbotrap-300 und Carbotrap-400 weisen im abgebildeten Bereich im wesentlichen die gleichen Peaks in etwa gleicher Höhe auf, ohne Flächenauswertung lassen sich hier kaum Aussagen treffen,
- im Chromatogrammbereich oberhalb 800 sec (nicht abgebildet) verfügt Carbotrap-400 im Vergleich zu den anderen Röhren über stark ausgeprägte Peaks,
- Tenax-TA adsorbiert im Retentionszeitbereich von 280 sec bis etwa 400 sec besser als die anderen Röhren, es sind deutlichere Peaks vorhanden,
- bei Tenax-TA sind ab der Retentionszeit von 500 sec die meisten Peaks nur sehr schwach ausgeprägt, der Peak bei 740 sec bildet hierbei eine Ausnahme.

Bei diesen Feststellungen ist aber folgendes zu beachten: Jeder Realbrand (auch bei so geringer Brandlast) verläuft etwas anders. Außerdem ist die Lufteinmischung vor der Absaugung nicht immer gleich, was durch die unterschiedlichen Rauchgastemperaturen vor der Ansaugung verdeutlicht wird. Aus diesem Grunde können die drei Chromatogramme pro PSM nur unzureichend untereinander verglichen werden. Dies führt zu der wichtigen Schlußfolgerung, bei den anschließenden Versuchen im kg-Maßstab die verschiedenen Adsorptionsröhren nicht nacheinander, sondern parallel einzusetzen.

5.2 Versuche in der Brandhalle

Um Versuche in größerem Maßstab (Größenordnung der Brandlast etwa 2 kg bis 3 kg) durchführen zu können, werden die Versuche vom Labor der FFB in die Versuchshalle nach Karlsruhe-Neureut verlegt. In der Versuchshalle ist die Gasabsaugung mit einer Anlage zur Reinigung und Nachverbrennung der Rauchgase ausgerüstet.

5.2.1 Versuchsaufbau

An der FFB wird ein Versuchsstand zur Verbrennung verschiedener Materialien im kg-Bereich entwickelt (Bild 12). Der Versuchsstand besteht aus einem etwa 1 m³ großen Verbrennungsraum aus Stahl. Über dem Verbrennungsraum befindet sich der Kamin, der die Abgase zur Absauganlage leitet. Um Störeinflüsse der Absauganlage zu vermeiden, sind Kamin und Absaugung nicht fest miteinander verbunden. Im unteren Bereich des Kamins befindet sich eine Meßstelle (4), an welcher während der Versuche kontinuierlich Temperatur, CO-Gehalt, CO₂-Gehalt und O₂-Gehalt gemessen werden. Unter dem Verbrennungsraum befindet sich ein Schubkasten, in dem das Löschwasser und heruntergefallene Teile des Brandgutes aufgefangen werden. Schubkasten und Brandraum sind durch einen Gitterrost getrennt, auf dem die Brandlast aufgeschichtet wird. In dem Schubkasten ist auch die Luftzufuhr untergebracht. Durch ein Rohr mit eingebautem Lüfter wird dem Verbrennungsraum über eine einstellbare Drosselklappe ein definierter Luftvolumenstrom zugeführt. In der Vorderfront des Brandraums ist eine temperaturbeständige Glasscheibe eingelassen. Seitlich befinden sich drei Bohrungen für die Probenahme. Gegenüber ist die Löschvorrichtung installiert. Das ursprünglich schräg eingebaute Rohr wird durch ein horizontal verschiebbares mit vertikaler Sprühhichtung ersetzt. Damit können die PSM wesentlich schneller gelöscht werden. Zur Messung der verbrauchten Löschwassermenge befindet sich zwischen Löschrohr und Wasseranschluß noch eine Wasseruhr.

Die Probenahme erfolgt über ein 0,75 m langes Edelstahlrohr mit einem Teflon-Innenrohr. Die Rohrleitung führt über ein Teflonfilter (baugleich mit dem bei den Vorversuchen verwendeten) zu einer Verzweigung in drei parallele Stränge, bevor das Gas über die Adsorptionsröhrchen gezogen wird, denen sich jeweils ein eigenes Rotameter anschließt. Danach münden die Gase wieder in eine gemeinsame Leitung, um von der Pumpe in die Atmosphäre gefördert zu werden.

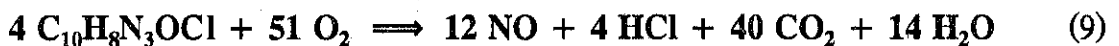
5.2.2 Versuchsdurchführungen

Die PSM werden unter Zuhilfenahme eines Stützfeuers aus Holz verbrannt. Dies hat einerseits den Grund, einen Realbrand nachzustellen, da auch dort Verpackungsmaterialien wie etwa Kartonagen oder Holzpaletten mitverbrennen, andererseits soll eine entsprechend hohe Verbrennungstemperatur und eine gute Luftzirkulation gewährleistet sein. In einer Zündwanne werden in Krippenanordnung drei Lagen zu je 5 Vierkant-Vollholzstücken (Maße 2 cm · 2 cm · 26,5 cm) auf zwei Eisenprofile geschichtet. In 30 weitere Vierkanthölzer wird eine etwa 23 cm lange, 14 mm breite und 15 mm tiefe Nut gefräst und mit PSM gefüllt. Diese werden in sechs Lagen über den Vollholzlagen aufgestapelt.

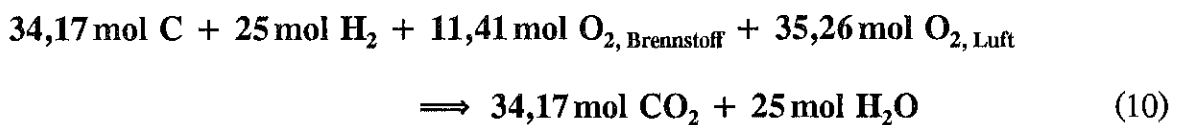
Zur Zündung werden zwei Weichholzstreifen mit 100 ml Spiritus getränkt und unter die Krippe gelegt. Nach dem ersten Versuch zeigt sich, daß die Anordnung während des Brandes zu instabil wird und seitlich auf den Rost zu kippen droht. Aus diesem Grunde wird eine weitere Lage Vollholz nach drei Lagen PSM-beladener Nuthölzer eingezogen. Die Weichholzstreifen werden mit einer Gasflamme gezündet. Die Probenahme für die Adsorptionsröhrchen erfolgt bei allen Versuchen an der Meßstelle (2). Gemessen wird mit dem Absaugrohr in der Mitte des Verbrennungsraumes, also etwa im Zentrum der Flamme. Wichtig bei der Probenahme ist natürlich der Entnahmezeitpunkt. Da jeder Realbrand einen anderen Verlauf zeigt, wird versucht, in einem Bereich zu messen, in dem die Temperatur relativ konstant bleibt. Dies ist der Bereich des Vollbrandes, in dem praktisch das gesamte Brandgut brennt. Nach einigen Minuten fällt dann die Temperatur auf Grund des Mangels an weiterem Brennstoff. Natürlich kann dieser Bereich nicht immer genau getroffen werden. Die "Konstanz" des Temperaturbereiches unterliegt Schwankungen von bis zu 50 °C. Der Temperaturverlauf eines Versuches mit Lentagran WP, gemessen an Meßstelle (4), ist in Bild 13 dargestellt. Dabei ist zu beachten, daß die Zündung erst eine Minute nach Beginn der Temperaturlaufzeichnung erfolgt.

Des weiteren ist die Luftzahl λ bei der Verbrennung von Interesse, die definiert ist als Verhältnis der vorhandenen zur stöchiometrisch erforderlichen Luftmenge. Bei den durchgeführten Versuchen sollte ein $\lambda > 1$ eingestellt werden, also unterstöchiometrische

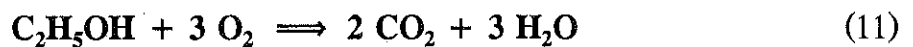
Verbrennung ausgeschlossen werden. Da von den PSM, wie in Kapitel 1 erwähnt, nur die Wirkstoffe bekannt sind, wird eine Berechnung unter der Annahme angestellt, das PSM bestünde ausschließlich aus dem Wirkstoff. Zugrundegelegt wird hierbei das PSM mit der größten Dichte, das heißt jenes, von dem im Versuch die größte Masse eingesetzt wird: Pyramin WG. Beim ersten Versuch mit Pyramin WG werden insgesamt 2070 g Holz (Weichholz und Fichtenholz) und 1038 g Pyramin WG eingesetzt. Mit einer Molmasse von 221,65 g/mol errechnet sich das eingesetzte PSM zu 4,68 mol. Pyramin WG verbrennt vollständig nach folgender Reaktionsgleichung:



Dies ergibt einen Sauerstoffbedarf von $4,68 \text{ mol} \cdot 51/4 = 59,71 \text{ mol}$ Sauerstoff. Das lufttrockene Fichtenholz besteht nach Literaturangaben [19] aus folgenden Bestandteilen (in Massenprozent): 17 % Wasser, 41 % Kohlenstoff, 5 % Wasserstoff, 36,5 % Sauerstoff und 0,5 % unbrennbare Stoffe. Dies bedeutet, daß pro kg Holz 410 g Kohlenstoff, 50 g Wasserstoff und 365 g Sauerstoff zur Verfügung stehen. Setzt man auch hier vollständige Verbrennung voraus und rechnet die Massen in Molzahlen um, so läuft die Verbrennung nach folgender Gleichung ab, bezogen auf 1 kg Holz:



Bei einer eingesetzten Masse von 2,07 kg werden also $2,07 \text{ kg} \cdot 35,26 \text{ mol/kg} = 73 \text{ mol}$ Luftsauerstoff verbraucht. Das Zündmittel Spiritus verbrennt nach der Gleichung:



100 ml Spiritus entsprechen 1,717 mol. Damit werden weitere 5,15 mol O_2 benötigt. Insgesamt ergibt sich somit ein Luftsauerstoffbedarf von 137,85 mol. Bei Normbedingungen (0°C , 1013 hPa) entspräche dies einem Volumen von $3,088 \text{ m}^3 \text{ O}_2$. Unter Versuchsbedingungen (20°C) errechnet sich daraus ein Luftvolumen von $15,8 \text{ m}^3$. Wenn der Brand 6 Minuten dauert, förderte der Lüfter in dieser Zeit bei vollständig geöffneter Klappe ein Luftvolumen von $16,3 \text{ m}^3$. Die Luftzahl ergibt sich somit zu $\lambda = 1,03 \approx 1$. Bei Betrachtung des gesamten Verbrennungsprozesses ist die Bedingung der nicht

unterstöchiometrischen Verbrennung nur so knapp erfüllt, daß örtlich und zeitlich ebenso häufig ein Mangel an Sauerstoff wie ein Überangebot herrschen werden.

Dies stellt sicherlich die Begründung für die bei allen PSM-Brandversuchen zu beobachtende Rußbildung dar, besonders ausgeprägt bei Tribunil. In einer ersten Versuchsreihe zeigt sich, daß der eingebaute Filter nicht in der Lage ist, bei allen PSM das Funktionieren der Anlage sicherzustellen. Der Filter setzt sich mehrmals während der Messungen so weit zu, daß die Rotameter nachgeregelt oder die Messungen sogar abgebrochen werden müssen. Deshalb wird die Entnahmestelle horizontal verschoben, um im rußärmeren Außenbereich der Flamme Proben zu nehmen, was im Chromatogramm aber eine starke Verkleinerung der Peaks zur Folge hat. Der Grund hierfür ist die Lufteinmischung. Das Probenahme-Rohr wird also wieder an seine alte Position gebracht und der Teflonfilter ausgebaut. Anstelle des Filters wird in das Absaugrohr ein Bausch silanisierter und hochreiner Glaswolle eingebracht. Damit können die größeren Rußteilchen aufgehalten und der Durchfluß sichergestellt werden.

Eine weitere Schwierigkeit stellt die mechanische Stabilität der Adsorptionsbetten in den Probenahme-Röhrchen dar. Der Sog der Pumpe löst bei einigen Röhrchen die Glaswolle und in einem Fall werden die Adsorptionsmaterialien in die Schlauchverbindungen gezogen. Bei Gasdurchsätzen von 0,5 l/min pro Röhrchen erweisen sich auch die handelsüblichen Röhrchen als zu schwach. Diesem Mangel kann durch den Einbau von Halteklammern in die Adsorptionsröhrchen abgeholfen werden.

5.2.2.1 Versuchsreihe 1

Aus einer größeren Zahl von Versuchen mit jedem PSM wird für die Auswertung jeweils ein repräsentativer Versuch ausgewählt. Die genauen Daten der Versuchsdurchführung wie eingesetzte Masse an PSM und Holz, Löschwasserbedarf, Versuchsablauf und Temperaturen bei Beginn und Ende der Probenahme sind in Tabelle 7 zusammengestellt. Bei diesen Versuchen kommen ausschließlich die handelsüblichen Röhrchen Carbotrap-300, Carbotrap-400 und Tenax-TA zum Einsatz.

Die drei Adsorptionsröhrchen werden desorbiert, die freigesetzten Substanzen mit dem GC/MS-System analysiert und anhand der Bibliotheksangaben identifiziert. Anschließend werden die Ergebnisse tabellarisch erfaßt: Tabellen 8...22.

Von jedem Peak wird die Retentionszeit (Spalte 2) bestimmt und das Massenspektrum gesichtet. In der Regel wird dann der erste Vorschlag der Bibliothek in die Tabellen aufgenommen. Hiervon wird nur abgewichen, wenn auf Grund von Retentionszeit und gemachter Erfahrung ein anderer Stoffvorschlag zwingend erscheint. Die Spalten 4...7 dieser Tabellen enthalten die Registriernummer beim Chemical Abstract Service [CARN] und die Werte für purity (Pur), fit und reverse fit (Rfit) des Bibliotheksvorschlags.

Nach der tabellarischen Auflistung der in den drei Adsorptionsröhrchen gefundenen Stoffe wird in Spalte 1 auf Grund der Retentionszeit einiger signifikanter Stoffe eine vergleichende Numerierung eingeführt, die jeweils nur für die drei Adsorptionsröhrchen desselben Versuchs Gültigkeit hat. Dies bedeutet, daß beispielsweise in Tabelle 8 (Dithane Ultra WG / Carbotrap-300) der Peak Nummer 13, hier Schwefel-Kohlenstoff (Kohlenstoff-Disulfid) [75-15-0] auch bei den beiden anderen Adsorptionsröhrchen diese Nummer trägt (beim Versuch mit Lentagran WP führt Schwefel-Kohlenstoff dagegen die Nummer 10). Findet sich bei einem Adsorptionsröhrchen im Gegensatz zu den anderen bei einer bestimmten Retentionszeit kein Peak, so wird an dieser Stelle eine Leerzeile eingefügt. Unter Nummer 8 findet sich bei mindestens einem der anderen Röhrchen ein Peak, der bei dem der Tabelle 8 zugrundeliegenden Röhrchen nicht vorhanden ist.

Obwohl üblicherweise die Stoffe mit dem ersten Vorschlag der Massenspektren-Bibliothek identifiziert werden, ist es nicht auszuschließen, daß trotz gleicher Retentionszeit auf verschiedenen Adsorptionsröhrchen verschiedenen Stoffe "detektiert" werden. Daß Massenspektren von Rauchgaskomponenten, die zwar auf verschiedenen Probenahme-Röhrchen angereichert werden, aber doch aus derselben Probe stammen, bei gleicher Retentionszeit von der Software des Massenspektrometers beziehungsweise von der verwendeten Spektrenbibliothek unterschiedlich interpretiert werden, muß als Systemmangel gewertet werden, der im gegenwärtigen Stand dieser Arbeit noch nicht eliminiert werden kann: Bei der Auswertung der Rauchgaseprobe von Tribunil auf Carbotrap-400-

Adsorptionsröhrchen (Tabelle 21) wird beispielsweise der Peak mit der Nummer 17 laut Massenspektren-Bibliothek als Isobuten-Nitril [126-98-7] angegeben. Bei der Auswertung des Tenax-TA-Röhrchens derselben Rauchgasprobe (Tabelle 22), kommt die Bibliothek dagegen beim Peak mit der gleichen Retentionszeit und damit ebenfalls mit der Nummer 17 zu einem Stoff namens 2-Ethyl-Butanal [97-96-1]. Eine zweifelsfreie Identifikation der Stoffe mit Hilfe von Reinstoff-Analysen würde den Zeit- und Kosten-Rahmen dieser Arbeit sprengen.

Um auch eine Einschätzung des Gefahrenpotentials des Bibliotheksvorschlages, also des mutmaßlichen Stoffes, zu erhalten, wird geprüft, ob der Stoff im "Handbuch der gefährlichen Güter" [20] enthalten ist. Bei vorhandenem Eintrag wird in der letzten Spalte die Nummer des zugehörigen Datenblattes (H.-Nr.) angegeben.

Als Grundlage zur Beurteilung der untersuchten Probenahme-Röhrchen dienen ihr Adsorptionsvermögen (und ihr Desorptionsvermögen, sh. S. 27) für die in PSM-Rauchgasen enthaltenen Substanzen. Da sich die Masse m_i der Rauchgaskomponente i in erster Näherung proportional zur Peakfläche verhält, gilt

$$m_i \sim \int y_i dt \quad (12)$$

wobei y_i das zeitabhängige Intensitätssignal des Peaks ist. Mit dem Gerätesystem können durch Integration die Flächen der Peaks im Chromatogramm bestimmt werden, woraus sich dann in weiteren Schritten die Massenanteile der Gemischkomponenten berechnen lassen. Die in der Spalte 8 der Tabellen 8...22 aufgelisteten Zahlen für die Peakflächen können allerdings nicht in einer Maßeinheit wie etwa cm^2 angegeben werden, vielmehr handelt es sich hierbei um gerätespezifisch normierte, dimensionslose Größen.

Als erstes wird bei jedem Probenahme-Röhrchen geprüft, ob es die verschiedenen leicht- bis schwerflüchtigen Substanzen im gleichen Maße adsorbiert (und bei der Desorption wieder freigibt). Hierfür werden die für die einzelnen Stoffe ermittelten Flächenwerte auf den Wert eines in allen Analysen vorkommenden Stoffes bezogen. Da zum einen bei jeder Verbrennung — auf Grund von Rekombinationsvorgängen in der Flammenfront — Benzol gebildet wird und da zum anderen die Größe des Benzolpeaks in den Chromato-

grammen nicht in dem Maße variiert wie die vieler anderer Peaks, wird in allen Chromatogrammen die jeweilige Fläche des Benzolpeaks als Bezugsgröße gewählt und in Spalte 9 der Tabelle aufgenommen:

$$\text{rel.Fl.}_{\text{Stoff } i} [\%] = 100 \cdot \text{Peakfläche}_{\text{Stoff } i} / \text{Peakfläche}_{\text{Benzol}} \quad (13)$$

In den Bildern 14...18 sind diese Benzol-bezogenen Peakflächen in Balkendiagrammen mit logarithmischer Ordinate über den nach der Retentionszeit geordneten Nummern der Peaks der einzelnen Rauchgaskomponenten aufgetragen. Die Peakflächen, die wenigstens 1 % der Fläche des jeweiligen Benzolpeaks erreichen, als Orientierung gewählt, lassen sich die Adsorptionsqualitäten der hier eingesetzten Probenahme-Röhrchen grob wie folgt bewerten:

- Carbotrap-300 eignet sich bevorzugt für die Adsorption von Molekülen der Größe C_2 bis C_8 ,
 - Carbotrap-400 zeigt das weiteste Adsorptionsspektrum von C_2 bis C_{10} und
 - Tenax-TA liefert nennenswert Peaks nur im Molekülgrößenbereich von C_4 bis C_8 ,
- womit die Herstellerangaben in Tabelle 2 über das Adsorptionsvermögen der hier eingesetzten Adsorbentien nicht in vollem Umfang bestätigt werden.

Um diese eher pauschale Qualifizierung der untersuchten Adsorptionsmaterialien zu präzisieren, das heißt, um die Güte der Adsorptionsröhrchen besser bewerten zu können, werden die Peaks, die mit der gleichen Retentionszeit in allen drei Röhrchen zu finden sind, miteinander verglichen, wozu ihre Flächen (Spalte 8 in den Tabellen 8...22) — den kleinsten der drei Peaks jeweils als Normierung gewählt — zueinander ins Verhältnis gesetzt werden. (Dabei spielt die Übereinstimmung der von der Bibliothek an dieser Position vorgeschlagenen Stoffnamen keine Rolle, vergl. S. 24). Trägt man diese Massenverhältnisse über den in den Tabellen 8...22 festgelegten Peak-Nummern auf, so erhält man ein anschauliches Bild von der Güte der Adsorptionsröhrchen (Bilder 19...23). Da nur die Peaks berücksichtigt werden, die bei allen drei Adsorptionsröhrchen zu finden sind, wird keine kontinuierliche Abszisse verwendet, statt dessen werden alle Vergleichspunkte im gleichen Längenabstand aufgetragen. Zum Beispiel ist in Bild 19 zu sehen, daß der Peak mit der Nummer 13 (Schwefel-Kohlenstoff) beim Adsorptionsröhrchen Carbotrap-400 etwa 25 mal größer ausfällt als bei den beiden anderen Adsorptionsröhrchen.

Die Frage, ob diese Unterschiede auf eine schlechtere Adsorption an Tenax-TA oder auf eine ineffizientere Desorption zurückzuführen sind, kann zur Zeit noch nicht beantwortet werden und muß weiterführenden Untersuchungen (Variation der Desorptionsparameter) vorbehalten bleiben. Wenn bei der weiteren Interpretation von Meßergebnissen, die mit Versuchen gewonnen werden, die auf der geschilderten Anlage durchgeführt werden, von Adsorption gesprochen wird, so schließt dies den Desorptionsvorgang mit ein.

Bei Tenax-TA sollte laut Herstellerangaben [14] der beste Adsorptionsbereich bei Molekulargrößen von $C_5 \dots C_{12}$ liegen. Es zeigt sich jedoch bei allen Versuchen der Versuchsreihe 1 (Bilder 19...23), daß Tenax-TA nur im Retentionsbereich von minimal 300 sec (beim Versuch mit Pyramin WG) bis maximal 550 sec (beim Versuch mit Tribunil), dies entspricht $C_4 \dots C_8$, gute Ergebnisse liefert. Größere Moleküle adsorbiert Tenax-TA deutlich schlechter, die Literaturangabe zu Tenax-TA kann in diesem Fall nur zum Teil bestätigt werden. Durch diesen engen Adsorptionsbereich kann Tenax-TA als Monobetröhrchen die im Feldversuch geweckte Erwartung, ein in weiten Bereichen einzusetzendes Adsorptionsmittel zur Verfügung zu haben, nicht erfüllen. Im Bereich < 300 sec und im Bereich > 500 sec hat Carbotrap-400 einen wesentlich besseren Adsorptionsgrad als die beiden anderen Adsorptionsröhrchen. Der gute Adsorptionsgrad im niedrigen Siedebereich ist sicherlich auf das Carboxen-569 und der im hohen Siedebereich auf das Carbotrap-F zurückzuführen, da sich Carbotrap-400 durch diese beiden Adsorbentien von Carbotrap-300 unterscheidet. Insbesondere beim Betrachten der Stofflisten (Tabellen 8...22) fällt auf, daß in diesen Bereichen bei Carbotrap-400 Stoffe detektiert werden können, die mit den anderen Röhrchen überhaupt nicht nachzuweisen sind.

Während bei allen Versuchen oberhalb von 700 sec Carbotrap-400 immer die besten Ergebnisse erzielt, kann im Mittelbereich der Retentionszeit von 300 sec bis 700 sec keines der untersuchten Adsorptionsmittel durchgängig die besten Ergebnisse erreichen. Allerdings liegen Carbotrap-400 und Tenax-TA in diesem Bereich meist dicht beieinander. Carbotrap-300 zeigt hier deutliche Schwächen. Insgesamt läßt sich sagen, daß mit Carbotrap-400 bereits ein sehr gutes Adsorptionsröhrchen zur Verfügung steht, das in einem sehr breiten Spektrum für Molekülgrößen von $C_3 \dots C_{12}$ eingesetzt werden kann.

Doch sollte versucht werden, die Adsorptionsgüte für die mittleren Molekülgrößen C₅ bis C₇ noch zu steigern.

5.2.2.2 Versuchsreihe 2

Da keines der Adsorptionsröhrchen der Versuchsreihe 1 über den gesamten Bereich die höchsten Massenverhältnisse erreichen kann, werden drei neue Adsorptionsröhrchen zusammengestellt, die Typen W.1, W.2 und W.3 (Kapitel 3.4.3). Das Hauptaugenmerk ist hierbei auf den mittleren Adsorptionsbereich (Retentionszeit etwa 370 sec bis 700 sec) gerichtet, der in den handelsüblichen Mehrbettröhrchen Carbotrap-300 und Carbotrap-400 vom Adsorbens Carbotrap-B abgedeckt wird. Da die Versuchsreihe 1 zeigt, daß Tenax-TA in diesem Bereich bessere Ergebnisse erzielt, wird es für die Probenahme-Röhrchen W.1 und W.3 gegen das Carbotrap-B der Carbotrap-300- beziehungsweise -400-Röhrchen ausgetauscht. Wegen der unterschiedlichen Dichte der beiden Sorbentien und der in Kapitel 3.4 beschriebenen vorgegebenen Abmessungen der Glasröhrchen und somit konstantem Volumen muß dabei die Gesamtmasse verändert werden. Da es sich bei W.3 tatsächlich um ehemalige Carbotrap-400-Röhrchen handelt, weichen die eingesetzten Sorbentienmassen nur auf Grund der unterschiedlichen Dichte ab. Beim Adsorptionsröhrchen W.1 dagegen werden die mit Ruß gemachten Erfahrungen berücksichtigt und zu Lasten des Carbotrap-C-Bettes ein etwas größerer Glaswollebausch eingebaut. Auf Grund der hohen Adsorptionsgüte von Carbotrap-400 in der ersten Versuchsreihe ist zu erwarten, daß W.3 in der Versuchsreihe 2 die besseren Ergebnisse liefern wird.

Mit dem Röhrchen W.2 soll versucht werden, eine Verbesserung der Adsorptionsqualität im Bereich der leichtflüchtigen Gaskomponenten zu erreichen. Deshalb werden am Ende dieses Probenahme-Röhrchens die beiden für kleine Moleküle geeigneten Sorbentien Carbosieve-SIII und Carboxen-569 kombiniert, wobei in Kauf genommen wird, daß hochsiedende Komponenten möglicherweise ein Problem darstellen. Wenn diese die wegen der großen Adsorbentien-Anzahl relativ kurzen Carbotrap-B- und -C-Betten durchbrechen, würden sie in den empfindlichen Betten dahinter adsorbiert. Dann wäre (wie in Kapitel 3.4.2 beschrieben) eine vollständige Desorption nicht mehr möglich. Da

Typ W.2 auf die Adsorption kleinmolekularer Substanzen orientiert ist, wird auf den Einsatz eines größeren Glaswollebausches verzichtet.

Bei der Versuchsreihe 2 werden wieder alle fünf PSM untersucht. Die genauen Daten der Versuchsdurchführung, wie eingesetzte Masse an PSM und Holz, Löschwasserbedarf, Versuchsablauf und Temperaturen zu Beginn und am Ende der Probenahme finden sich in Tabelle 23.

Wie bereits in der ersten Versuchsreihe treten auch in der zweiten Reihe Schwierigkeiten mit Rußpartikeln auf, da durch den Glaswollebausch im Absaugrohr der Ruß nur unvollständig zurückgehalten wird. So trifft der Ruß je nach Bauart des Röhrchens entweder auf eine Glasfritte und wird dort abgeschieden oder er dringt bei fehlender Fritte in die Adsorptionsbetten ein. Der Ruß kann in mehrfacher Hinsicht zu einer Beeinflussung der Meßergebnisse führen. Da Ruß selbst ein Adsorptionsmaterial ist, lagern sich bereits während der Rußentstehung Brandgaskomponenten an die Rußteilchen an, die bei der Desorption vom Ruß freigesetzt werden. Messungen am Glaswollebausch im Probenahme-Rohr bestätigen dies. Trifft nun der Ruß auf die Adsorptionsröhrchen, so bringt dieser zusätzliches, aus der Gasphase bereits entferntes Adsorbat mit. Weiterhin baut der Ruß durch Abscheidung an der Fritte ein weiteres Adsorptionsbett auf, das de facto zu einer Massenzunahme des Adsorptionsmaterials im Röhrchen führt. Bei Röhrchen ohne Fritte dagegen dringt der Ruß in die Adsorptionsbetten ein. Dabei erscheint es möglich, daß sowohl der Ruß selbst adsorbiert wird, als auch, daß am Ruß angelagerte Stoffe auf die Adsorptionsgranulate übertragen werden. In wie weit dabei die aktiven Oberflächen der Adsorptionsbetten beschädigt werden, kann derzeit nicht untersucht werden. Da die dadurch hervorgerufenen Effekte offensichtlich nicht zu vernachlässigen sind, ist Adsorptionsröhrchen mit Glasfritten der Vorzug zu geben. Natürlich besteht für diese weiterhin die Gefahr, durch zuviel Ruß zugesetzt zu werden. Mit mehr Glaswolle im Probenahme-Rohr kann der Effekt jedoch etwas abgemildert werden.

Bei den Versuchen werden mit den Röhrchen Carbotrap-400, W.1, W.2 und W.3 Proben genommen. Carbotrap-400 und W.3 werden bei allen Versuchen eingesetzt, W.1 und W.2 jeweils im Wechsel. Der Grund hierfür liegt in der erwarteten guten Leistung von W.3

und bei Carbotrap-400 in der Notwendigkeit, einen Vergleichsmaßstab zur Versuchsreihe 1 zu erhalten.

Neben den Brandversuchen mit PSM wird ein Versuch ausschließlich mit Holz durchgeführt, mit einer Menge, die der bei den PSM-Versuchen eingesetzten entspricht, um Art und Konzentration der vom Holzfeuer freigesetzten Brandgase zu beurteilen und möglicherweise abschätzen zu können, in welchem Umfang die gefundenen (Schad-)Stoffe vom PSM oder vom Holz erzeugt werden. Wie in Kapitel 6.5 näher erläutert, lassen sich jedoch die Emittenten der detektierten Rauchgasinhaltsstoffe so einfach nicht ermitteln. Dieser Versuch wird mit den Röhren Carbotrap-400, Tenax-TA und W.3 durchgeführt.

5.2.2.3 Auswertung der Versuchsreihe 2

Die Auswertung der Versuchsreihe 2 erfolgt in den gleichen Schritten wie bei der Versuchsreihe 1: Tabellarische Auflistung (Tabellen 24...41) der detektierten Rauchgaskomponenten, Numerierung der gefundenen Stoffe an Hand signifikanter Retentionszeiten innerhalb eines Versuches, Ermittlung der auf den jeweiligen Benzol-Peak bezogenen relativen Flächen der einzelnen Peaks (Bilder 24...29) und Berechnung der Verhältnisse untereinander der von den verschiedenen Adsorbentien aufgenommenen Massen (Bilder 30...35).

Es zeigt sich, daß bei einigen Versuchen die Erwartungen an die neuen Adsorptionsröhren weitgehend erfüllt werden, während andere Röhren Ergebnisse liefern, die sich nur schwer erklären lassen. Im folgenden werden jeweils die Massenverhältnis-Diagramme der Versuchsreihe 2 (Bilder 30...34) jenen der Versuchsreihe 1 (Bilder 19...23) gegenübergestellt und bewertet.

a) Dithane Ultra WG

Vergleicht man die Ergebnisse der Versuchsreihe 1 (Bild 19) mit denen der Versuchsreihe 2 (Bild 30), so erkennt man, daß bei Versuchsreihe 2 wesentlich mehr Stoff-

komponenten gemeinsam detektiert werden. Des weiteren ist gut zu erkennen, daß das Röhrchen W.3 die an seinen Aufbau geknüpften Erwartungen erfüllt. Problematisch ist der hochsiedende Bereich. Nicht so ausgeprägt wie bei Tribunil in der zweiten Versuchsreihe zeigen sich auch hier Vorteile des Röhrchens W.1 im Vergleich zu Carbotrap-400 und W.3. Möglicherweise beeinflusst die starke Rußbildung das Adsorptionsverhalten. Der Ruß wird sich im W.1-Röhrchen in den Adsorptionsbetten abscheiden, während er bei allen anderen in der Fritte aufgehalten wird.

b) Lentagran WP

Wie vorgesehen, zeigt das Röhrchen W.2 beim Versuch mit Lentagran WP (Bild 31) ein gutes Adsorptionsvermögen hinsichtlich der leicht siedenden Stoffe und ein schlechtes in bezug auf die schwerer siedenden, was auch für Retentionszeiten unterhalb von 293 sec zu erwarten wäre. Das Röhrchen W.3 zeigt leichte Verbesserungen gegenüber Carbotrap-400. Vergleicht man die Ergebnisse dieses Versuchs mit jenen der ersten Versuchsreihe (Bild 20), so stellt man fest, daß trotz der Tatsache, daß W.2 im hochsiedenden Bereich einige Stoffe überhaupt nicht detektiert (z.B. Naphthalin), bei allen drei Adsorptionsröhrchen insgesamt mehr Stoffe gefunden werden.

c) Pyramin WG

Bei dem Versuch der zweiten Versuchsreihe mit Pyramin WG (Bild 32) liegt die Massenverhältniskurve des Röhrchens W.3 für fast jede Brandgaskomponente über den Kurven der anderen Adsorptionsröhrchen, sogar im Bereich tiefsiedender Substanzen werden die Leistungen von W.2 übertroffen. Bei diesem Versuch werden die Erwartungen an das Adsorptionsröhrchen in vollem Umfang erfüllt. Ein Grund hierfür könnte das überdurchschnittlich gute Abschneiden des Tenax-TA-Röhrchens beim Versuch der ersten Versuchsreihe (Bild 21) sein. Darüber hinaus fällt auf, daß in der zweiten Versuchsreihe im Gegensatz zur ersten praktisch keine Schwefel-Verbindungen detektiert werden. Wegen unvollständiger Herstellerauskünfte kann zur Zeit nicht geklärt werden, welche von den beiden Analysen in diesem Punkte stimmt.

d) Rubitox

Betrachtet man die Massenverhältnisse beim Versuch mit Rubitox (Bild 33), so erkennt man, daß im Retentionsbereich ab 600 sec eine starke Überlegenheit des Carbotrap-400 gegenüber dem Typ W.3 besteht, obwohl auch dieses Röhrchen über das für hochsiedende Substanzen geeignete Carbotrap-F verfügt. Die Gründe für diese deutliche Abweichung vom erwarteten Kurvenverlauf müssen in weiteren Versuchen geklärt werden. Des weiteren zeigt sich, daß im tiefsiedenden Bereich das Carbotrap-400 im Vergleich zur ersten Versuchsreihe (Bild 22) schlechter abschneidet. In der Tendenz zeigt sich allerdings, daß der Typ W.3 durchaus über den ganzen Bereich brauchbare Ergebnisse liefert. Wie erwartet hat Typ W.2 gute Eigenschaften im tiefsiedenden Bereich.

e) Tribunil

Das Röhrchen vom Typ W.1 zeigt beim Versuch mit Tribunil (Bild 34) sehr gute Adsorptionseigenschaften auch im Bereich der hochsiedenden Komponenten, obwohl nach den guten Ergebnissen von Carbotrap-400 bei Tribunil in der ersten Versuchsreihe (Bild 23) zu erwarten wäre, daß die besten Adsorptionsergebnisse vom Röhrchen W.3 erzielt würden. Eine Erklärung dieses Phänomens könnte in der ausgeprägten Neigung zur Rußbildung dieses PSM liegen, die so stark war, daß nicht nur — wie in der Versuchsreihe 1 — die Volumenströme an den Ventilen der Rotameter bei W.3 und Carbotrap-400 nachgeregelt werden mußten, weil sich die Fritten zusetzten, sondern daß auch zwei Versuche abgebrochen und mit vergrößerten Glaswolle-Rußfiltern wiederholt werden mußten. Wie bereits beschrieben, kommt es vermutlich durch die Aufnahme der Rußpartikel zu der deutlichen Verbesserung der Adsorptionseigenschaften des Röhrchens W.1 im hochsiedenden Bereich. Bei den beiden anderen Röhrchen dagegen wird die Aufnahme von Ruß in den Adsorptionsbetten durch die Glasfritten verhindert. Bei starker Rußbildung empfiehlt sich also die Vorschaltung stärkerer Filter. Ob dies nur durch Glaswolle erreicht werden kann, erscheint fraglich.

f) Unbehandeltes Fichtenholz

Mit Holz als ausschließlicher Brandlast wird nur ein Versuch durchgeführt (Bilder 29 und 35). Es ergeben sich einige Besonderheiten, bei denen die Ergebnisse des Holzbrandes stark von den PSM-Bränden abweichen. So erweist sich in diesem Fall Tenax-

TA als bestes Adsorptionsröhrchen. Erstmals ist bei den Massenverhältnissen ein Tenax-TA-Röhrchen über den gesamten Bereich besser als Carbotrap-400 und W.3. Ob dies am Brandgut, an der geringeren eingesetzten Masse und damit niedrigeren Rauchgaskonzentrationen in der Probe oder an Meßfehlern liegt, muß im einzelnen noch untersucht werden. Es ist dennoch zu erkennen, daß das Adsorptionsvermögen des Röhrchens W.3 jenes von Carbotrap-400 auch bei diesem Versuch übertrifft.

5.2.3 Fazit der beiden Versuchsreihen

Selbstverständlich treten auch bei der GC/MS-Analyse der zweiten Versuchsreihe die gleichen Probleme mit der Interpretation von Massenspektren auf wie bei der ersten Versuchsreihe (sh. S. 25). Um wenigstens ansatzweise die im System begründeten Ungereimtheiten bei der Zuordnung differierender Namensvorschläge trotz übereinstimmender Retentionszeiten zu eliminieren, werden alle Ergebnisse in den Tabellen 8...22 und 24...41 mit einer Sammlung bisheriger GC/MS-Analysenergebnisse [21] verglichen. Bei jedem Stoff wird für die Retentionszeit der am häufigsten genannte Wert mit "*" als "richtig" markiert. — So angemessen dieses Verfahren für Substanzen erscheint, die in sehr vielen Analysen gefunden werden (Furan [110-00-9], *o*-Xylol [95-47-6], Benzol [71-43-2], ...), so zweifelhaft ist es für Einzelercheinungen wie 1-(Methyl-Oxy)-2-Methyl-Butan [62.016-48-2] oder Spiro[3.3]-Hepta-1,5-dien [22.635-78-5].

Substanzen, deren Identität in der Erstausswertung der Analyse nicht geklärt werden kann, und solche, die ganz offensichtlich falsch interpretiert werden (weil in allen anderen Analysen bei der fraglichen Retentionszeit ein anderer Stoff genannt wird), werden durch Vergleich mit den anderen Versuchsergebnissen des gleichen PSM korrigiert, wobei die erste Priorität den parallel beladenen Probenahme-Röhrchen aus derselben Versuchsreihe eingeräumt wird. Um diese Korrekturen zu kennzeichnen, fehlen bei diesen Stoffen in den Tabellen 8...22 und 24...41 die Werte für Purity, Fit und R-Fit. Die der ursprünglich fehlerhaften Identifikation zugeordneten Peakflächen- und Konzentrations-Werte

behalten jedoch ihre Gültigkeit. Wo solche Nachbesserungen nicht möglich sind, bleibt in den Tabellen statt einer Stoffbezeichnung weiterhin das “?”.

Da es wegen der Vielzahl der Interpretationsdifferenzen praktisch nicht möglich ist, die Kompatibilität der 33 Ergebnis-Tabellen untereinander zu prüfen, sind in Tabelle 42 die Rauchgaskomponenten – einschließlich der ungeprüften NIST-Vorschläge – zusammengestellt, die mit der GC/MS-Analytik bei diesen Verbrennungs- und Löschversuchen mit Pflanzenschutzmitteln und bei früheren Versuchen mit Kunststoffen “detektiert” wurden. Die Tabelle ist nach den für den vorliegenden Forschungsbericht gemessenen Retentionszeiten (t_R [sec] in Spalte 2) sortiert und nennt zuerst die Ausreißer (ohne * in Spalte 6, mit $t_{R?}$ in Spalte 3) mit der Nummer der Tabelle (Spalte 1), aus der sie stammen. Substanzen ohne t_R erhielten für die Retentionszeit mehrdeutige Ergebnisse oder stammen aus Analysen, die in diesem Bericht nicht enthalten sind. * steht bei Stoffen mit un-zweideutiger Retentionszeit (auch wenn sie nur einmal detektiert werden) und bei den in früheren Versuchen gefundenen.

Sowohl die Zuordnung derselben Stoffbezeichnung zu Chromatogramm-Peaks mit unterschiedlichen Retentionszeiten

Beispiel: 2-Methylen-4-Penten-Nitril [28.769-50-8] mit $t_R = 595$ sec in Tabelle 15 und mit $t_R = 547$ sec in Tabelle 16 $\rightarrow \Delta t_R = 8,4$ %

oder: Propen [115-07-1] mit $t_R = 279$ sec ... 296 sec in den Tabellen 38, 40 und 41 $\rightarrow \Delta t_R \approx 3$ % gegenüber dem meistgenannten Wert von 286 sec

als auch die Mehrdeutigkeit der Interpretation des Massenspektrums einer zu einer bestimmten Zeit eluierenden Substanz (Stoffe mit “sicherer” Retentionszeit am Ende der Tabelle 42)

Beispiel: Dimethyl-Amin [124-40-3] und Methyl-Silan [992-94-9] beide mit $t_R = 254$ sec in den Tabellen 20 und 36

oder: 1-(3,4-Dimethyl-Phenyl)-2-Amino-Propan [102-31-8], Benzol-Hexan-Amin [17.734-20-2], 1,2,3-Trimethyl-Benzol [526-73-8], 1,3-bis-Benzol-2-Vinyl-Propan [61.141-97-7] und 7-Ethyl-1,3,5-Cycloheptatrien [17.634-51-4] alle mit $t_R = 858$ sec

machen die Problematik bei der Handhabung der GC/MS-Analyse deutlich, worauf in zurückliegenden Stellungnahmen zu der Ansicht, nach diesem Analyseverfahren könne

das Universal-Gefahrstoff-Meßgerät der Feuerwehr arbeiten [22], schon hingewiesen worden ist [21, 23]. Die von der verwendeten GC-Trennsäule ermittelten Retentionszeiten werden mit so hoher Genauigkeit reproduziert ($\Delta t_{R, \text{Naphthalin}} \approx 2 \text{ ‰}$), daß davon auszugehen ist, daß die Interpretationsdifferenzen im System, beziehungsweise in der darin enthaltenen Software und der von dieser benutzten Spektrenbibliothek [24], begründet sind und nicht in tatsächlicher Retentionszeitenübereinstimmung.

Für einige exemplarische Substanzen, die in nahezu allen Analysen zu finden sind, werden die Siedepunkte überprüft, die – in erster Linie – das Retentionsverhalten bestimmen. Danach dürfen die in den Tabellen 24...41 fett hervorgehobenen Identifikationsvorschläge als relativ sicher gelten, obwohl unter den an der entsprechenden Position vom System jeweils angebotenen 10 Vorschlägen die wenigsten dieser Stoffe die erste Priorität einnehmen. In Bild 36 sind ihre Siedepunkte über der Retentionszeit aufgetragen.

Nach Abschluß der beiden Versuchsreihen läßt sich mit den Ergebnissen der Rauchgasanalysen von PSM-Bränden eine Empfehlung zur Verwendung des Röhrchens W.3 begründen. Da die Sammeleffizienz der Probenahme-Röhrchen auch vom Probenvolumen und von der Durchflußrate abhängt, muß für quantitative Messungen der Einfluß dieser Parameter noch untersucht werden. Darüber hinaus sollten noch Untersuchungen bezüglich der Verwendung von Glasfritten und Rußfiltern durchgeführt werden. Problematisch beim Rußfilter ist, daß dieser nicht oder so wenig wie möglich als Adsorbens wirken darf, da sonst im Adsorptionsröhrchen ein Teil der Brandgaskomponenten nicht mehr ankommt. Eine Möglichkeit wäre, im Fall starker Rußbildung mit den Adsorptionsröhrchen nur kleine Probenvolumina zu nehmen und dort, wo der Nutzen die Kosten aufwiegt (Feuerwehreinsatz), nach der Probenauswertung die Röhrchen nicht mehr zu verwenden, um Rußanreicherungen zu vermeiden.

6. KONZENTRATIONSBERECHNUNG

Die quantitative Auswertung der Chromatogramme erfolgt durch den Vergleich der bei der Analyse und bei der Kalibrierung gefundenen Peakflächen, die nach Gleichung (12) proportional zur gemessenen Substanzmenge sind. Das Verhältnis der Masse m_i der Komponente i zur Peakfläche A_i wird als Responsefaktor $F_{R,i}$ bezeichnet. Damit gilt für jede Substanz:

$$m_i = F_{R,i} \cdot A_i \quad (14)$$

Als Standardisierungsverfahren werden in der GC/MS-Analytik die Verfahren des externen Standards, des internen Standards und das Additionsverfahren eingesetzt [25]. Die externe Standardisierung entspricht dem klassischen Kalibrierverfahren.

6.1 Externer Standard

Das Verfahren ist unter anderem in der VDI-Richtlinie 3482, Blatt 6 beschrieben [26]. Bei dieser Methode müssen für die nach der qualitativen Auswertung interessierenden Probenkomponenten Kalibrierkurven erstellt werden. Dazu wird ein Kalibriergas bereitgestellt, das diese Komponenten in bekannten Konzentrationen enthält. Die Aufgabe unterschiedlicher Volumina des Kalibriergases und damit unterschiedlicher, aber bekannter Massen der zu bestimmenden Komponenten auf die Adsorptionsmaterialien, ihre anschließende Desorption und Analyse und die Auftragung der Peakflächen der Standardkomponenten über den eingesetzten Substanzmengen ergibt die Kalibrierfunktionen (Bild 37). Im Bereich der Linearität der Kalibrierfunktion wird dann der absolute Responsefaktor $F_{Ra,i}$ der Komponente i (im Unterschied zum nachfolgend definierten relativen Responsefaktor $F_{Rr,i}$) als reziproker Wert der Steigung der Kalibriergeraden bestimmt.

Die nichtlinearen Bereiche lassen sich wie folgt erklären: Das GC/MS-System wird auf Grund unvermeidbarer aktiver Oberflächen stets eine sehr geringe Menge Substanz aufnehmen. Bewegt man sich nun mit der Substanzmenge in Bereichen nahe der Nachweisgrenze, so bewirken diese geringen Adsorptionen eine Verringerung der Peakfläche

(Adsorptionseffekt). Geben diese Stellen dagegen vorher adsorbierte Substanzen wieder frei, so führt dies zu einer Zunahme der Peakfläche (Memoryeffekt). Werden die Kalibrierkurven ebenfalls mit Hilfe von Adsorptionsröhrchen aufgenommen, wobei grundsätzlich Fehlerquellen durch den Adsorptions- beziehungsweise Desorptionsprozeß zusätzlich einfließen, so werden im Bereich hoher Substanzmengen die Adsorptionsmaterialien zunehmend gesättigt und nicht mehr adsorbierbare Substanzmengen passieren die Adsorptionsmaterialien ungehindert: Es kommt zum sogenannten Durchbruch. Bei zunehmender, auf das Adsorbens aufgegebener Substanzmenge erhöht sich bei der anschließenden Desorption die Peakfläche kaum noch. Die Steigung der Kurve fällt ab und nähert sich einer Asymptote (Sättigungseffekt).

Die Ermittlung der Konzentration c_i der Probenkomponente i im Probenvolumen V_P erfolgt unter Benutzung der Konzentrationsdefinition und unter der Voraussetzung, daß die Peakfläche A_i der Probenkomponente im linearen Bereich der Kalibrierfunktion liegt, nach der Formel:

$$c_i = F_{R_{a,i}} \cdot \frac{A_i}{V_P} \quad (15)$$

Als problematisch bei diesem Verfahren hat sich seine Anfälligkeit erwiesen, da auftretende Fehler oder Meßschwankungen der Anlage direkt ins Ergebnis eingehen. Als Ursache seien hier beispielhaft Injektionsfehler und Veränderungen am Massenspektrometer wie etwa Veränderungen am Filament, an der Ionisationsenergie oder am Vakuum genannt.

6.2 Interner Standard

Bei diesem Verfahren wird wie beim externen Standard ein Kalibriergas benutzt, das die in der Probe interessierenden Substanzen in bekannter Zusammenstellung enthält. Bei der Aufnahme der Eichkurve $A_i = f(m_i)$ wird jedoch vor jeder Einzelanalyse der sogenannte interne Standard in stets gleichbleibender Menge hinzugefügt und anstatt die absolute Fläche des Peaks der Komponente i über deren eingesetzter Menge aufzutragen, werden in jeder Analyse die individuellen Peakflächen auf die Fläche des Peaks des internen

Standards A_{St} bezogen und diese Flächenverhältnisse als Funktion der Substanzmengen definiert. Der reziproke Wert des Gradienten dieser Kurve wird als relativer Responsefaktor $F_{Rr,i}$ bezeichnet. Die gesuchte Konzentration errechnet sich so zu

$$c_i = F_{Rr,i} \cdot \frac{A_i}{V_P \cdot A_{St}} \quad (16)$$

Wenn vor der Analyse einer Probe unbekannter Zusammensetzung dieser die gleiche Menge des internen Standards hinzugefügt wird, kann mit Hilfe des relativen Responsefaktors aus den ermittelten Flächenverhältnissen auf die Mengenverhältnisse in der Probe geschlossen werden. Als interner Standard werden üblicherweise deuterierte Verbindungen (beispielsweise Ethyl-Benzol $C_2D_5-C_6D_5$ [25.837-05-2]) verwendet, da solche Stoffe in der Natur praktisch nicht vorkommen und der Standard somit leicht zu identifizieren ist. Ebenfalls wichtig bei der Auswahl des Standards ist es, zu beachten, daß dieser an einer Stelle im Chromatogramm eluiert, an der es keine Koeluat gibt, da die in diesem Fall erhaltenen Flächen nicht zur Berechnung herangezogen werden können. Dieses Auswahlkriterium läßt sich jedoch nur erfüllen, wenn bei der Probe bereits Kenntnisse über zu erwartende Stoffe vorhanden sind.

Indem alle Meßwerte einer Analyse jeweils auf den internen Standard dieser Analyse bezogen werden, dessen Wert exakt unter den gleichen Bedingungen gewonnen wird wie die aller im Gemisch enthaltenen Komponenten, eliminiert die Methode des internen Standards Ungenauigkeiten, die beim externen Standard dadurch entstehen, daß die Geräteparameter während der Analyse nicht vollkommen mit jenen während der Aufnahme der Eichkurve übereinstimmen können, stellt jedoch andererseits bei jedem Hinzufügen der Bezugssubstanz hohe Anforderungen an die Dosierungsgenauigkeit.

6.3 Konzentrations-Abschätzung

Für die drei Komponenten Benzol, Toluol und *o*-Xylol steht ein zertifiziertes Kalibrier gas (BTX-Standard mit $c_{Benzol} = 30,1 \text{ mg/m}^3$, $c_{Toluol} = 2.023,5 \text{ mg/m}^3$ und $c_{Xylol} = 766,2 \text{ mg/m}^3$ unter Versuchsbedingungen bei 20 °C) zur Verfügung, mit dem die Konzen-

tration dieser drei Substanzen in den untersuchten Brandgasen nach dem Verfahren des externen Standards bestimmt werden kann. Für jede der drei Komponenten wird eine Kalibrierkurve erstellt. Dazu werden Adsorptionsröhrchen mit Kalibriergas beladen und anschließend desorbiert. Die so ermittelten Werte werden in einem Diagramm aufgetragen (Bild 38). Im linearen Bereich erhält man dann nach Gleichung (14) die gesuchten Kalibrierfaktoren $F_{Ra,i}$:

$$F_{Ra, \text{Benzol}} = 3,53 \cdot 10^{-6} \text{ mg,}$$

$$F_{Ra, \text{Toluol}} = 1,60 \cdot 10^{-6} \text{ mg und}$$

$$F_{Ra, \text{Xylol}} = 0,96 \cdot 10^{-6} \text{ mg.}$$

Damit können nun in den Brandgasproben die drei im Standard vorhandenen Komponenten einer quantitativen Betrachtung unterzogen werden. Eine Beurteilung der Konzentration der anderen Brandgaskomponenten ist nur unter Annahme einiger Vereinfachungen möglich. So kann beispielsweise davon ausgegangen werden, daß sich die Kalibrierfaktoren aller gefundenen Stoffe in derselben Größenordnung bewegen — eine Annahme, die im Hinblick auf tabellierte Kalibrierfaktoren durchaus auf viele Stoffe zutreffen scheint [25] —, um damit eine erste, grobe Abschätzung vornehmen zu können.

Da Benzol bei jeder Verbrennung auftritt und da die Benzolpeaks auf Grund ihrer Größe und Eindeutigkeit relativ unanfällig für Fehler erscheinen, wird der Kalibrierfaktor von Benzol $F_{Ra, \text{Benzol}}$ den weiteren Berechnungen zugrunde gelegt. Dann gelte für die Masse der jeweiligen gesuchten Rauchgaskomponente m_i

$$m_i = F_{Ra, \text{Benzol}} \cdot A_i \quad (17)$$

Unter Berücksichtigung, daß

$$F_{Ra, \text{Benzol}} = m_{\text{Benzol}} / A_{\text{Benzol}} \quad (18)$$

mit m_{Benzol} = Masse des Benzols in der Rauchgasprobe und A_{Benzol} = Fläche des Benzolpeaks in der Rauchgasprobe, folgt unter Verwendung der Definition der Konzentration für die gesuchte Konzentration der Komponente i :

$$c_i = \frac{A_i}{A_{\text{Benzol}}} \cdot c_{\text{Benzol}} \quad (19)$$

Damit können auf Grund der Benzolkonzentrationen im Brandgas und mit den Benzolbezogenen Flächenwerten die Konzentrationen der anderen Komponenten abgeschätzt

werden. Da, verglichen mit den anderen Probenahme-Röhrchen, die mit dem Röhrchen W.3 ermittelten Analysenergebnisse die zuverlässigsten zu sein scheinen, werden ausschließlich die Werte dieses Röhrchen-Typs zur Konzentrationsberechnung herangezogen. Die Ergebnisse sind in den Tabellen 26, 29, 32, 35, 38 und 41 in der letzten Spalte wiedergegeben. Es zeigt sich, daß viele Stoffe bereits in nennenswerten Konzentrationsbereichen liegen. Schwefel-Kohlenstoff beispielsweise hat bei der Feuerwehr einen Einsatz-Toleranzwert von 30 mg/m^3 [27, 28]. Wird dieser Wert überschritten, so müssen besondere Gefahrenabwehrmaßnahmen ergriffen werden. Wie aus Tabelle 26 ersichtlich ist, werden beim Versuch mit Dithane Ultra WG $11.582,6 \text{ mg/m}^3$ gemessen.

6.4 Fehlerabschätzung

Der bei dieser Abschätzung in Kauf genommene Fehler läßt sich an Hand der beiden anderen Komponenten Toluol und *o*-Xylol des Standards beurteilen: Errechnet man beim Adsorptionsröhrchen W.3 des zweiten Versuchs mit Tribunil die Toluol-Konzentration nach Gleichung (15), so erhält man einen Wert für $c_{\text{Toluol}} = 118,03 \text{ mg/m}^3$. Der über den Benzol-Responsefaktor abgeschätzte Wert nach Gleichung (19) ergibt $c_{\text{Toluol}} = 177,03 \text{ mg/m}^3$, das heißt, er liegt etwa 50 % zu hoch.

Auf Grund der vielen Annahmen und Vereinfachungen ist die Abschätzungsmethode sehr ungenau, je nach wirklichem Kalibrierfaktor der Komponenten können noch größere Fehler auftreten. Allerdings ist diese Methode im Augenblick die einzige zur Verfügung stehende Möglichkeit, um mit einer groben Abschätzung zumindest die Größenordnung der Konzentrationen zu treffen. Insbesondere bei schnell benötigten Analysen (z.B. bei Feuerwehreinsätzen) lassen sich damit Aussagen treffen, ob und in welchem Umfang Mittel zur Gefahrenabwehr eingesetzt werden müssen, sofern man sich in Konzentrationsbereichen befindet, bei denen die MAK (maximale Arbeitsplatz-Konzentration) oder der ETW (Einsatz-Toleranzwert) erreicht werden.

6.5 Vergleich der Brandgaskonzentrationen zwischen Holz und PSM

Vergleicht man die errechneten Konzentrationen der Brandgaskomponenten von Holz (Tabelle 41) mit jenen der Pflanzenschutzmittel (Tabellen 26, 29, 32, 35 und 38), so fällt auf, daß einerseits erhebliche qualitative Unterschiede zwischen den ermittelten Brandgasgemischen vorliegen und daß andererseits die Konzentrationen der detektierten Komponenten in den Brandgasen von Holz sehr niedrig ausfallen. In Tabelle 43 werden die Konzentrationen der häufigsten Brandgaskomponenten von Holz jenen des PSM Pyramin WG gegenübergestellt. Die Konzentrationen der meisten Rauchgasbestandteile von Holz liegen etwa um den Faktor 5 bis 10 niedriger, bei einigen Stoffen wie z.B. Benzol sogar um den Faktor 100, als jene von Pyramin WG.

Daraus kann jedoch nicht geschlossen werden, daß bei Bränden von Holz und PSM der überwiegende Teil der entstehenden Brandgaskomponenten aus dem PSM stammen muß und daß der Anteil der aus dem Holz stammenden Konzentrationen in erster Näherung vernachlässigt werden könnte, denn die Bedingungen unter denen diese beiden Brandversuche durchgeführt werden, sind, was die Stöchiometrie betrifft, nicht zu vergleichen. Darüber hinaus entstehen sicherlich auch einige der detektierten Substanzen aus Rekombinationen von Radikalen in der Flamme. Ob aber diese Radikale ursprünglich aus Holz- oder aus PSM-Zersetzungsprodukten stammen, läßt sich mit dieser Analyse nicht beantworten.

7. ZUSAMMENFASSUNG UND AUSBLICK

7.1 Zusammenfassung

Ziel dieses Forschungsauftrages war es, für die Punktanalyse von Gasen, die beim Brand von Pflanzenschutzmitteln freigesetzt werden, geeignete Adsorptionsmaterialien auszuwählen, zu bewerten und die Auswahl zu verbessern.

Um erste Kenntnisse über das Brand- und Zersetzungsverhalten der PSM zu erlangen, mußte eine Vielzahl von Voruntersuchungen durchgeführt werden. Hierbei wurde deutlich, daß offensichtlich eine große Anzahl von Gefahrstoffen entsteht (sh. H.-Nr. in den Analysen-Tabellen). Ihre relativ gute Brennbarkeit und ihre Neigung, sich während des Löschens wieder zu entzünden, waren Anlaß, die Löschvorrichtung des Versuchstandes zu verbessern. In diesem Versuchstand wurden mit 5 verschiedenen PSM Brandversuche im kg-Bereich bei rechnerisch nahezu stöchiometrischen Bedingungen durchgeführt.

Bei der Auswahl geeigneter Adsorptionsmaterialien mußte vom üblichen Verfahren der Aufzeichnung von Adsorptions-Isothermen zur Charakterisierung der Adsorptionsgüte abgewichen werden, da die diesem Verfahren zugrunde liegenden Bedingungen der Realität bei den durchgeführten Brandversuchen nicht entsprachen. Statt dessen wurden in Parallelmessungen verschiedene Adsorptionsmaterialien untereinander verglichen.

Schwierigkeiten traten bei den Untersuchungen immer wieder durch die starke Rußbildung auf, wodurch einige Meßergebnisse verfälscht wurden.

Nach der Erprobung von drei am Markt erhältlichen Adsorptionsröhrchen wird eine Bewertung ihrer Adsorptionsgüte vorgenommen. Da alle drei Röhrchen den Anforderungen nur in Teilbereichen des zu untersuchenden Gemischspektrums genügten, wurde versucht, durch Einbau anderer Adsorbentien sowie durch neue Zusammenstellungen von Adsorptionsmaterialien die Tauglichkeit der Probenahme-Röhrchen zu verbessern. Die Auswertung weiterer Versuche ergab, daß dies mit einer der neuen Adsorbentien-Kombinationen (Röhrchen W.3) erreicht werden kann.

7.2 Ausblick

Trotz dieser Verbesserung besteht weiterer Forschungsbedarf. So stellt nach wie vor der Ruß ein großes Problem dar. Hält der Rußfilter zuwenig Rußpartikel auf, so lagert sich

Ruß in den Adsorptionsröhrchen ab und verändert die Meßergebnisse. Scheidet der Filter dagegen zuviel Ruß ab, so durchläuft das Brandgas praktisch ein vorgeschaltetes Adsorptionsbett und ein Teil der Gaskomponenten erreicht das eigentliche Adsorptionsröhrchen nicht mehr.

Bei einigen stark rußenden Bränden setzen sich allerdings trotz Glaswollefilter im Probenahme-Rohr die Glasfritten der Adsorptionsröhrchen zu. Aus diesem Grund sollten die Fritten nach jeder Probenahme gereinigt werden. Hier böte sich entweder die Reinigung mit Lösemitteln an, was einen permanenten Lösemittelpeak bei allen weiteren Messungen zur Folge hätte, oder das aufwendigere Verfahren der Entnahme der Adsorbentien, Oxidation der Fritte im Luftstrom und anschließende Wiederbefüllung des Röhrchens. Röhrchen ohne Fritten sollten aus den oben dargelegten Gründen nicht mehr verwendet werden.

Weitere Versuche sollten gefahren werden, um die gewonnenen Ergebnisse zu untermauern und um sowohl die Luftzahl als auch die Produktauswahl, etwa der realere Fall des Brandes von mehreren Produkten (Produktmix), variieren zu können. Hierbei könnten noch weitere Adsorbentien-Zusammenstellungen getestet werden. Ebenfalls von Bedeutung wäre auch die Untersuchung des Durchbruchverhaltens solcher Rauchgaskomponenten, von denen Teilmengen die Adsorptionsröhrchen passieren, ohne adsorbiert zu werden: Bei welchen Substanzen tritt dieses Phänomen auf und in welcher Größenordnung liegt die nicht adsorbierte Menge?

Durch die geplante Anschaffung eines leistungsfähigeren Thermodesorbers für die GC/MS-Anlage wird sicherlich die Konzentrationsabschätzung wesentlich genauer, eventuell wird damit sogar eine wirkliche Quantifizierung möglich werden.

8. LITERATURVERZEICHNIS

- [1] Anonym:
Spritzmittel brannten — ein Lagerhausbrand,
BRAND AUS 98 (1990), Heft 12, Seite 454...459
- [2] Industrieverband Agrar e.V. (iva):
Jahresbericht 1994/95,
Frankfurt am Main 1995
- [3] Bundesminister für Umwelt,
Naturschutz und Reaktorsicherheit:
Neufassung der zwölften Verordnung zur Durchführung des Bundes-Immissionschutzgesetzes (Störfall-Verordnung),
BGBl.I, Seite 1891, Bonn, 20.9.1991
Änderung: BGBl.I, Seite 1782, 20.10.93
- [4] Industrieverband Pflanzenschutz e.V. (ips):
IPS-Leitlinie — Brandschutz in Pflanzenschutzmittellägern,
Frankfurt am Main 1988
- [5] Steiniger, Ludwig:
Brände in Lagern für Pflanzenschutzmittel — Teil 1: Bildung von Stoffen nach Anhang II der Störfall-Verordnung beim Brand von Pflanzenschutzmitteln,
TÜ — Technische Überwachung, 31 (1990), Heft 11, Seite 478...483
- [6] Brand, Bernhard:
Brände in Lagern für Pflanzenschutzmittel — Teil 2: Berechnung und Bewertung von Schadstoffimmissionen infolge von Bränden in Lagern von Pflanzenschutzmitteln,
TÜ — Technische Überwachung, 31 (1990), Heft 11, Seite 484...488
- [7] Cabelka, Ulrich:
Brände in Pflanzenschutzmittellägern — Erkenntnisse aus Brandversuchen im Tonnen-Maßstab,
TÜ — Technische Überwachung, 34 (1993), Heft 11, Seite 442...447
- [8] Industrieverband Agrar e.V. (iva):
Wirkstoffe in Pflanzenschutz- und Schädlingsbekämpfungsmitteln — physikalisch-chemische und toxikologische Daten,
2. Aufl.,
Bayrischer Landwirtschaftsvlg. (BLV), München, Wien,... 1990
- [9] Kast, Werner:
Adsorption aus der Gasphase — ingenieurwissenschaftliche Grundlagen und technische Verfahren,
Vlg. Chemie, Weinheim,... 1988
- [10] Atkins, Peter W.:
Einführung in die physikalische Chemie — ein Lehrbuch für alle Naturwissenschaftler,
Vlg. Chemie, Weinheim,... 1993
- [11] Gans, Wolfgang:
Gleichgewicht und Kinetik bei der Adsorption organischer Dämpfe an Aktivkohle,
VDI-Fortschrittsberichte, Reihe 3 — Verfahrenstechnik, Nummer 116,
VDI-Verlag, Düsseldorf 1986
- [12] Langmuir, Irving:
The evaporation, condensation and reflection of molecules and the mechanism of adsorption,
Physical Review, Serie 2, 8 (1916), Seite 149...176
- [13] Brunauer, Stephen:
The adsorption of gases and vapors,
Oxford University Press, London 1943
- [14] Sigma-Aldrich Chemie GmbH,
Geschäftsbereich Supelco:
Chromatographie-Produkte,
Deisenhofen 1996

- [15] Matz, Gerhard et al.:
Schnellanalyse bei Chemieunfällen und
Bränden mit mobilem GC/MS-System,
Abschlußbericht BMBF 01 VQ 9109/3,
Technische Universität Hamburg-Har-
burg (TUHH), Arbeitsbereich Meß-
technik,
Hamburg 1995
- [16] Schomburg, Gerhard:
Gaschromatographie - Grundlagen,
Praxis, Kapillartechnik, 2. Aufl.,
Vlg. Chemie, Weinheim,... 1987
- [17] Perkin-Elmer & Co GmbH:
Gaschromatograph Serie 8500
- Gerätehandbuch,
Überlingen/Bodensee 1988
- [18] Finnigan MAT GmbH:
Ion Trap Detector -
Systembeschreibung,
Bremen 1988
- [19] Neumüller, Otto-Albrecht:
RÖMPPs Chemie-Lexikon, 8. Aufl.,
Franckh'sche Vlgdltg., Stuttgart 1988
und Falbe, Jürgen und Manfred Regitz:
RÖMPP Chemie-Lexikon, 9. Aufl.,
Thieme-Vlg., Stuttgart 1989...95
- [20] Hommel, Günter et al.:
Handbuch der gefährlichen Güter,
9. Aufl.,
Springer-Vlg., Berlin,... 1997
- [21] Föhl, C. Axel und Peter Basmer:
Untersuchung der Löschverfahren und
Löschmittel zur Bekämpfung von Brän-
den gefährlicher Güter,
Forschungsbericht Nr. 96 der Arbeits-
gemeinschaft der Innenministerien der
Bundesländer - Arbeitskreis V - Aus-
schuß für Feuerwehrangelegenheiten,
Karlsruhe 1995
- [22] Habermaier, Frank:
Gibt es doch das
Universal-Analysengerät?,
Brandschutz / Deutsche Feuerwehr-Zei-
tung 40 (1986), Heft 7, Seite 278...281
- [23] Föhl, C. Axel und Peter Basmer:
Untersuchung der Löschverfahren und
Löschmittel zur Bekämpfung von Brän-
den gefährlicher Güter - GC/MS-Rauch-
gasanalyse,
Forschungsbericht Nr. 81 der Arbeits-
gemeinschaft der Innenministerien der
Bundesländer - Arbeitskreis V - Unter-
ausschuß "Feuerwehrangelegenheiten",
Karlsruhe 1992
- [24] National Institute for Standards and
Technology (NIST) und US Environmen-
tal Protection Agency (EPA):
Mass Spectra Database, PC-Version 3.0,
Gaithersburg (Maryland) 1990
- [25] Hübschmann, Hans-Joachim:
Handbuch der GC/MS - Grundlagen und
Anwendung,
Vlg. Chemie, Weinheim,... 1996
- [26] VDI-Richtlinie 3482, Blatt 6,
VDI-Verlag, Düsseldorf 1988
- [27] Vereinigung zur Förderung des Deut-
schen Brandschutzes e.V. (vfdb):
Jahresfachtagung vom 11. bis 15. Juni
im Gesellschaftshaus am Zoo,
Frankfurt/Main 1995
- [28] Buff, Klaus:
Die toxikologische Bewertung von
Schadstoffkonzentrationen bei groß-
räumigen Freisetzungen,
Vortrag Nr. 11 in [27]

9. BILDER UND TABELLEN

Bild	1: Die Abhängigkeit des Bedeckungsgrades ϑ vom Druck p	53
Bild	2: Die handelsüblichen Adsorptionsröhrchen Carbotrap-300, Carbotrap-400 und Tenax-TA	54
Bild	3: Die Probenahmeröhrchen W.1, W.2 und W.3 mit abgeänderter Adsorbentien-Kombination	55
Bild	4: Der Aufbau des Thermodesorbers	56
Bild	5: Das Chromatogramm eines Gemisches aus Benzol, Toluol und <i>o</i> -Xylol (BTX-Standard)	56
Bild	6: Der Ion-Trap-Detector™	57
Bild	7: Das Massenspektrum von Benzol in der NIST-Bibliothek [24]	58
Bild	8: Ein selbst gemessenes Massenspektrum von Benzol	58
Bild	9: Der Versuchsaufbau für die Vorversuche	59
Bild	10: Die Chromatogramme von Lentagran WP -Brandgasen, angereichert auf Carbotrap-300-, Carbotrap-400- und Tenax- TA-Adsorptionsröhrchen	60
Bild	11: Die Chromatogramme von Rubitox -Brandgasen, angereichert auf Carbotrap-300-, Carbotrap-400- und Tenax-TA-Adsorp- tionsröhrchen	61
Bild	12: Der Versuchstand für Verbrennungsversuche im kg-Bereich	62
Bild	13: Der Verlauf der Temperatur an der Meßstelle 4 bei dem Brandversuch mit Lentagran WP aufgetragen über der Ver- suchsdauer	62
Bild	14: Die Peakflächen in den Chromatogrammen von Dithane Ultra WG bezogen auf die Fläche des jeweiligen Benzol- Peaks beim Einsatz verschiedener Adsorptionsröhrchen, aufgetragen über der Peak-Nummer	63
Bild	15: Die Peakflächen in den Chromatogrammen von Lentagran WP bezogen auf die Fläche des jeweiligen Benzol-Peaks beim Einsatz verschiedener Adsorptionsröhrchen, aufgetragen über der Peak-Nummer	64

Bild	16: Die Peakflächen in den Chromatogrammen von Pyramin WG bezogen auf die Fläche des jeweiligen Benzol-Peaks beim Einsatz verschiedener Adsorptionsröhrchen, aufgetragen über der Peak-Nummer	65
Bild	17: Die Peakflächen in den Chromatogrammen von Rubitox bezogen auf die Fläche des jeweiligen Benzol-Peaks beim Einsatz verschiedener Adsorptionsröhrchen, aufgetragen über der Peak-Nummer	66
Bild	18: Die Peakflächen in den Chromatogrammen von Tribunil bezogen auf die Fläche des jeweiligen Benzol-Peaks beim Einsatz verschiedener Adsorptionsröhrchen, aufgetragen über der Peak-Nummer	67
Bild	19: Die Verhältnisse der von Carbotrap-300, Carbotrap-400 und von Tenax-TA adsorbierten Massen der Brandgaskomponenten von Dithane Ultra WG , aufgetragen über ihrer Peak-Nummer	68
Bild	20: Die Verhältnisse der von Carbotrap-300, Carbotrap-400 und von Tenax-TA adsorbierten Massen der Brandgaskomponenten von Lentagran WP , aufgetragen über ihrer Peak-Nummer	69
Bild	21: Die Verhältnisse der von Carbotrap-300, Carbotrap-400 und von Tenax-TA adsorbierten Massen der Brandgaskomponenten von Pyramin WG , aufgetragen über ihrer Peak-Nummer	70
Bild	22: Die Verhältnisse der von Carbotrap-300, Carbotrap-400 und von Tenax-TA adsorbierten Massen der Brandgaskomponenten von Rubitox , aufgetragen über ihrer Peak-Nummer	71
Bild	23: Die Verhältnisse der von Carbotrap-300, Carbotrap-400 und von Tenax-TA adsorbierten Massen der Brandgaskomponenten von Tribunil , aufgetragen über ihrer Peak-Nummer	72
Bild	24: Die Peakflächen in den Chromatogrammen der zweiten Versuchsreihe mit Dithane Ultra WG bezogen auf die Fläche des jeweiligen Benzol-Peaks beim Einsatz verschiedener Adsorptionsröhrchen, aufgetragen über der Peak-Nummer	73
Bild	25: Die Peakflächen in den Chromatogrammen der zweiten Versuchsreihe mit Lentagran WP bezogen auf die Fläche des jeweiligen Benzol-Peaks beim Einsatz verschiedener Adsorptionsröhrchen, aufgetragen über der Peak-Nummer	74

Bild	26: Die Peakflächen in den Chromatogrammen der zweiten Versuchsreihe mit Pyramin WG bezogen auf die Fläche des jeweiligen Benzol-Peaks beim Einsatz verschiedener Adsorptionsröhrchen, aufgetragen über der Peak-Nummer	75
Bild	27: Die Peakflächen in den Chromatogrammen der zweiten Versuchsreihe mit Rubitox bezogen auf die Fläche des jeweiligen Benzol-Peaks beim Einsatz verschiedener Adsorptionsröhrchen, aufgetragen über der Peak-Nummer	76
Bild	28: Die Peakflächen in den Chromatogrammen der zweiten Versuchsreihe mit Tribunil bezogen auf die Fläche des jeweiligen Benzol-Peaks beim Einsatz verschiedener Adsorptionsröhrchen, aufgetragen über der Peak-Nummer	77
Bild	29: Die Peakflächen in den Chromatogrammen von unbehandeltem Fichtenholz bezogen auf die Fläche des jeweiligen Benzol-Peaks beim Einsatz verschiedener Adsorptionsröhrchen, aufgetragen über der Peak-Nummer	78
Bild	30: Die Verhältnisse der von Carbotrap-400, von W.1 und W.3 adsorbierten Massen der Brandgaskomponenten in der zweiten Versuchsreihe mit Dithane Ultra WG , aufgetragen über ihrer Peak-Nummer	79
Bild	31: Die Verhältnisse der von Carbotrap-400, von W.2 und W.3 adsorbierten Massen der Brandgaskomponenten in der zweiten Versuchsreihe mit Lentagran WP , aufgetragen über ihrer Peak-Nummer	80
Bild	32: Die Verhältnisse der von Carbotrap-400, von W.2 und W.3 adsorbierten Massen der Brandgaskomponenten in der zweiten Versuchsreihe mit Pyramin WG , aufgetragen über ihrer Peak-Nummer	81
Bild	33: Die Verhältnisse der von Carbotrap-400, von W.2 und W.3 adsorbierten Massen der Brandgaskomponenten in der zweiten Versuchsreihe mit Rubitox , aufgetragen über ihrer Peak-Nummer	82
Bild	34: Die Verhältnisse der von Carbotrap-400, von W.1 und W.3 adsorbierten Massen der Brandgaskomponenten in der zweiten Versuchsreihe mit Tribunil , aufgetragen über ihrer Peak-Nummer	83

Bild	35: Die Verhältnisse der von Carbotrap-400, Tenax-TA und von W.3 adsorbierten Massen der Brandgaskomponenten von unbehandeltem Fichtenholz, aufgetragen über ihrer Peak-Nummer	84
Bild	36: Die Siedepunkte einiger ausgewählter, auf Carbotrap-400 angereicherter PSM-Rauchgaskomponenten, aufgetragen über ihrer Retentionszeit	85
Bild	37: Die Kalibrierfunktion als Abhängigkeit der Größe der Peakfläche von der Menge der untersuchten Probensubstanz	86
Bild	38: Die Kalibrierfunktionen des BTX-Standards: Benzol, Toluol und <i>o</i> -Xylol	86
Tabelle	1: Die Charakteristika der eingesetzten Pflanzenschutzmittel (PSM)	87
Tabelle	2: Die Kenndaten der untersuchten Adsorbtionsmaterialien	88
Tabelle	3: Die Reaktion der einzelnen PSM auf einen Zündversuch mit einem Streichholz	88
Tabelle	4: Die Reaktion der PSM auf Erwärmung mit einem 500 W-Brenner	88
Tabelle	5: Die Zersetzungsprodukte der PSM, wenn sie bei 150 °C verschwelt werden	89
Tabelle	6: Die Zersetzungsprodukte der PSM, wenn sie bei 200 °C verschwelt werden	90
Tabelle	7: Die Arbeitsprotokolle in der Versuchsreihe 1 mit Carbotrap-300-, Carbotrap-400- und Tenax-TA-Adsorptionsröhrchen	91
Tabelle	8: Die Identifikationsvorschläge der NIST-Massenspektrenbibliothek für die auf Carbotrap-300-Adsorptionsröhrchen angereicherten Rauchgasbestandteile von Dithane Ultra WG	92
Tabelle	9: Die Identifikationsvorschläge der NIST-Massenspektrenbibliothek für die auf Carbotrap-400-Adsorptionsröhrchen angereicherten Rauchgasbestandteile von Dithane Ultra WG	93
Tabelle	10: Die Identifikationsvorschläge der NIST-Massenspektrenbibliothek für die auf Tenax-TA-Adsorptionsröhrchen angereicherten Rauchgasbestandteile von Dithane Ultra WG	95

Tabelle 11: Die Identifikationsvorschläge der NIST-Massenspektrenbibliothek für die auf Carbotrap-300 -Adsorptionsröhrchen angereicherten Rauchgasbestandteile von Lentagran WP	96
Tabelle 12: Die Identifikationsvorschläge der NIST-Massenspektrenbibliothek für die auf Carbotrap-400 -Adsorptionsröhrchen angereicherten Rauchgasbestandteile von Lentagran WP	98
Tabelle 13: Die Identifikationsvorschläge der NIST-Massenspektrenbibliothek für die auf Tenax-TA -Adsorptionsröhrchen angereicherten Rauchgasbestandteile von Lentagran WP	99
Tabelle 14: Die Identifikationsvorschläge der NIST-Massenspektrenbibliothek für die auf Carbotrap-300 -Adsorptionsröhrchen angereicherten Rauchgasbestandteile von Pyramin WG	100
Tabelle 15: Die Identifikationsvorschläge der NIST-Massenspektrenbibliothek für die auf Carbotrap-400 -Adsorptionsröhrchen angereicherten Rauchgasbestandteile von Pyramin WG	102
Tabelle 16: Die Identifikationsvorschläge der NIST-Massenspektrenbibliothek für die auf Tenax-TA -Adsorptionsröhrchen angereicherten Rauchgasbestandteile von Pyramin WG	104
Tabelle 17: Die Identifikationsvorschläge der NIST-Massenspektrenbibliothek für die auf Carbotrap-300 -Adsorptionsröhrchen angereicherten Rauchgasbestandteile von Rubitox	106
Tabelle 18: Die Identifikationsvorschläge der NIST-Massenspektrenbibliothek für die auf Carbotrap-400 -Adsorptionsröhrchen angereicherten Rauchgasbestandteile von Rubitox	107
Tabelle 19: Die Identifikationsvorschläge der NIST-Massenspektrenbibliothek für die auf Tenax-TA -Adsorptionsröhrchen angereicherten Rauchgasbestandteile von Rubitox	109
Tabelle 20: Die Identifikationsvorschläge der NIST-Massenspektrenbibliothek für die auf Carbotrap-300 -Adsorptionsröhrchen angereicherten Rauchgasbestandteile von Tribunil	110
Tabelle 21: Die Identifikationsvorschläge der NIST-Massenspektrenbibliothek für die auf Carbotrap-400 -Adsorptionsröhrchen angereicherten Rauchgasbestandteile von Tribunil	112
Tabelle 22: Die Identifikationsvorschläge der NIST-Massenspektrenbibliothek für die auf Tenax-TA -Adsorptionsröhrchen angereicherten Rauchgasbestandteile von Tribunil	114

Tabelle 23: Die Arbeitsprotokolle in der Versuchsreihe 2 mit Carbotrap-400-, W.1-, W.2- und W.3-Adsorptionsröhrchen	116
Tabelle 24: Die Identifikationsvorschläge der NIST-Massenspektrenbibliothek für die auf Carbotrap-400-Adsorptionsröhrchen angereicherten Rauchgasbestandteile in der zweiten Versuchsreihe mit Dithane Ultra WG	117
Tabelle 25: Die Identifikationsvorschläge der NIST-Massenspektrenbibliothek für die auf W.1-Adsorptionsröhrchen angereicherten Rauchgasbestandteile von Dithane Ultra WG	118
Tabelle 26: Die Identifikationsvorschläge der NIST-Massenspektrenbibliothek für die auf W.3-Adsorptionsröhrchen angereicherten Rauchgasbestandteile von Dithane Ultra WG	120
Tabelle 27: Die Identifikationsvorschläge der NIST-Massenspektrenbibliothek für die auf Carbotrap-400-Adsorptionsröhrchen angereicherten Rauchgasbestandteile in der zweiten Versuchsreihe mit Lentagran WP	121
Tabelle 28: Die Identifikationsvorschläge der NIST-Massenspektrenbibliothek für die auf W.2-Adsorptionsröhrchen angereicherten Rauchgasbestandteile von Lentagran WP	123
Tabelle 29: Die Identifikationsvorschläge der NIST-Massenspektrenbibliothek für die auf W.3-Adsorptionsröhrchen angereicherten Rauchgasbestandteile von Lentagran WP	124
Tabelle 30: Die Identifikationsvorschläge der NIST-Massenspektrenbibliothek für die auf Carbotrap-400-Adsorptionsröhrchen angereicherten Rauchgasbestandteile in der zweiten Versuchsreihe mit Pyramin WG	125
Tabelle 31: Die Identifikationsvorschläge der NIST-Massenspektrenbibliothek für die auf W.2-Adsorptionsröhrchen angereicherten Rauchgasbestandteile von Pyramin WG	127
Tabelle 32: Die Identifikationsvorschläge der NIST-Massenspektrenbibliothek für die auf W.3-Adsorptionsröhrchen angereicherten Rauchgasbestandteile von Pyramin WG	128
Tabelle 33: Die Identifikationsvorschläge der NIST-Massenspektrenbibliothek für die auf Carbotrap-400-Adsorptionsröhrchen angereicherten Rauchgasbestandteile in der zweiten Versuchsreihe mit Rubitox	130

Tabelle 34: Die Identifikationsvorschläge der NIST-Massenspektrenbibliothek für die auf W.2-Adsorptionsröhrchen angereicherten Rauchgasbestandteile von Rubitox	131
Tabelle 35: Die Identifikationsvorschläge der NIST-Massenspektrenbibliothek für die auf W.3-Adsorptionsröhrchen angereicherten Rauchgasbestandteile von Rubitox	132
Tabelle 36: Die Identifikationsvorschläge der NIST-Massenspektrenbibliothek für die auf Carbotrap-400-Adsorptionsröhrchen angereicherten Rauchgasbestandteile in der zweiten Versuchsreihe mit Tribunil	133
Tabelle 37: Die Identifikationsvorschläge der NIST-Massenspektrenbibliothek für die auf W.1-Adsorptionsröhrchen angereicherten Rauchgasbestandteile von Tribunil	135
Tabelle 38: Die Identifikationsvorschläge der NIST-Massenspektrenbibliothek für die auf W.3-Adsorptionsröhrchen angereicherten Rauchgasbestandteile von Tribunil	137
Tabelle 39: Die Identifikationsvorschläge der NIST-Massenspektrenbibliothek für die auf Carbotrap-400-Adsorptionsröhrchen angereicherten Rauchgasbestandteile von unbehandeltem Fichtenholz	139
Tabelle 40: Die Identifikationsvorschläge der NIST-Massenspektrenbibliothek für die auf Tenax-TA-Adsorptionsröhrchen angereicherten Rauchgasbestandteile von unbehandeltem Fichtenholz	140
Tabelle 41: Die Identifikationsvorschläge der NIST-Massenspektrenbibliothek für die auf W.3-Adsorptionsröhrchen angereicherten Rauchgasbestandteile von unbehandeltem Fichtenholz	141
Tabelle 42: Die Zusammenstellung der Rauchgaskomponenten, die mit der GC/MS-Analytik bei Verbrennungs- und Löschversuchen mit Pflanzenschutzmitteln und bei früheren Versuchen mit Kunststoffen "detektiert" wurden	142
Tabelle 43: Die Konzentrationen einiger Rauchgasbestandteile von Holzbränden verglichen mit jenen in Pyramin WG-Bränden	157

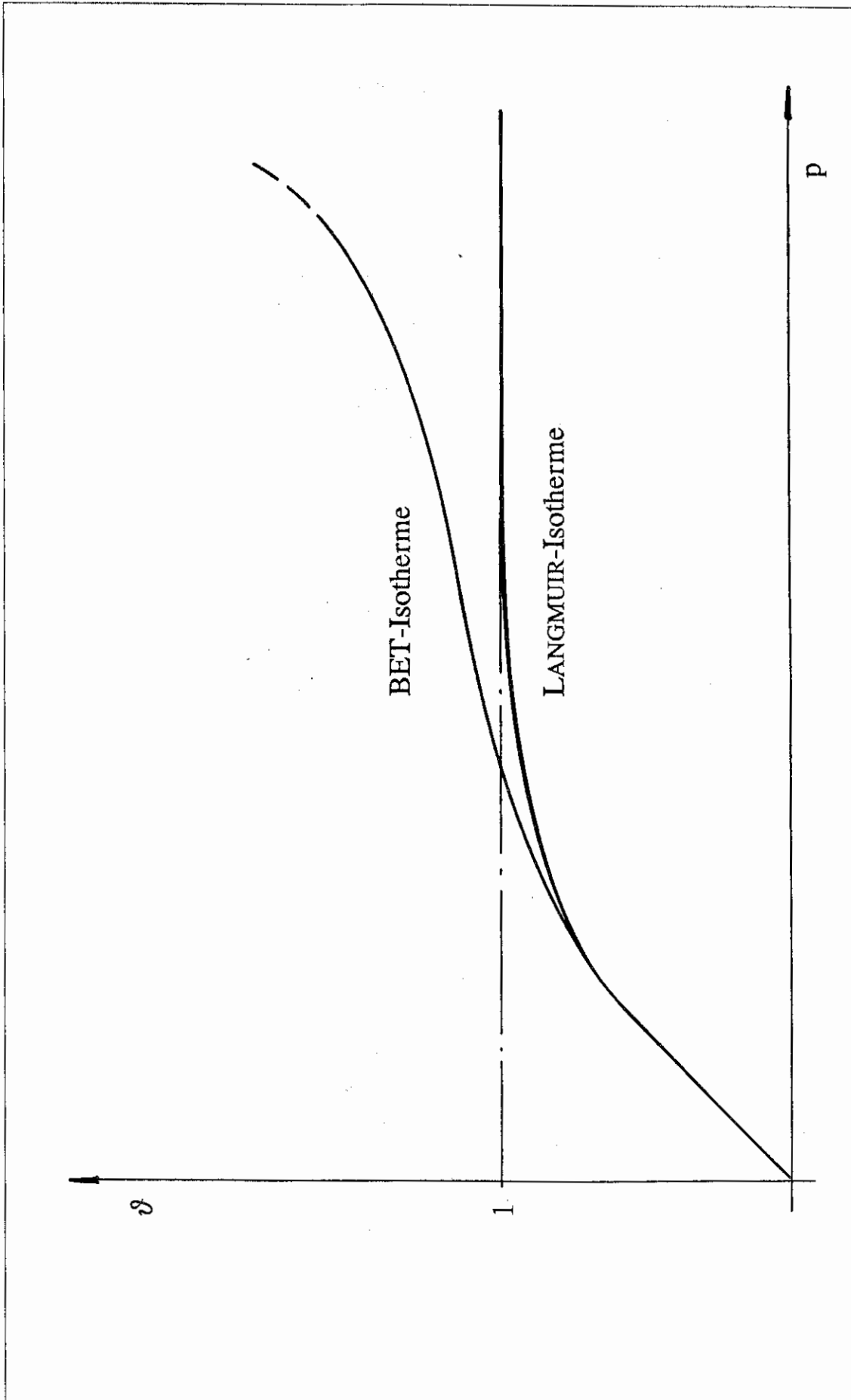


Bild 1: Die Abhängigkeit des Bedeckungsgrades ϑ vom Druck p

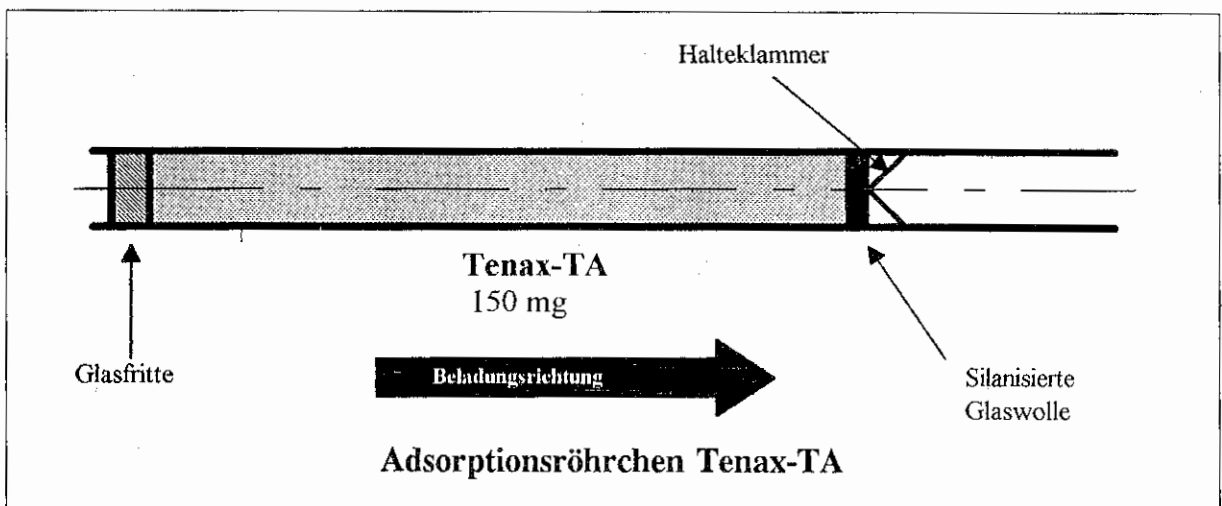
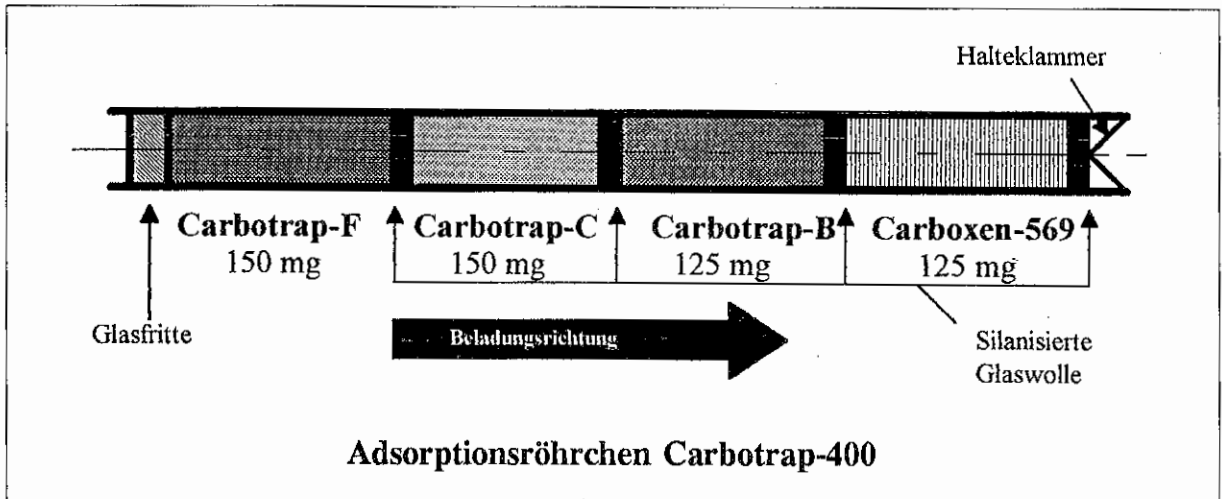
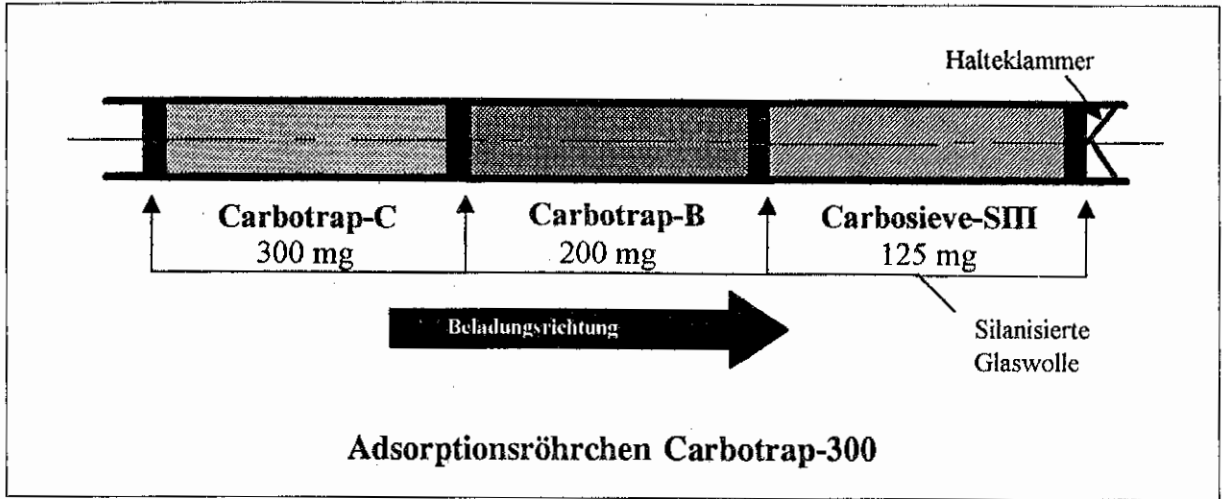


Bild 2: Die handelsüblichen Adsorptionsröhrchen Carbotrap-300, Carbotrap-400 und Tenax-TA

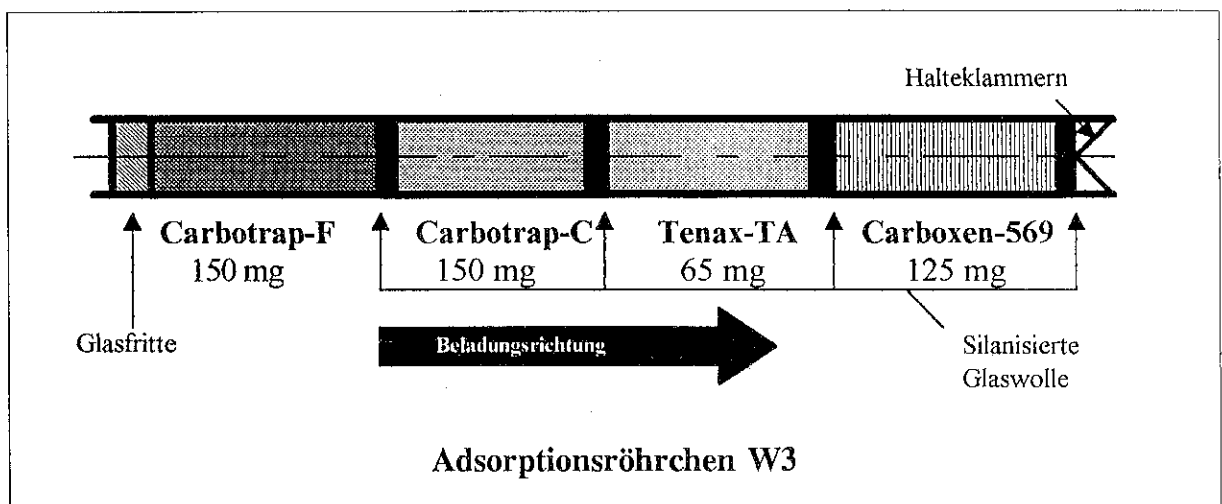
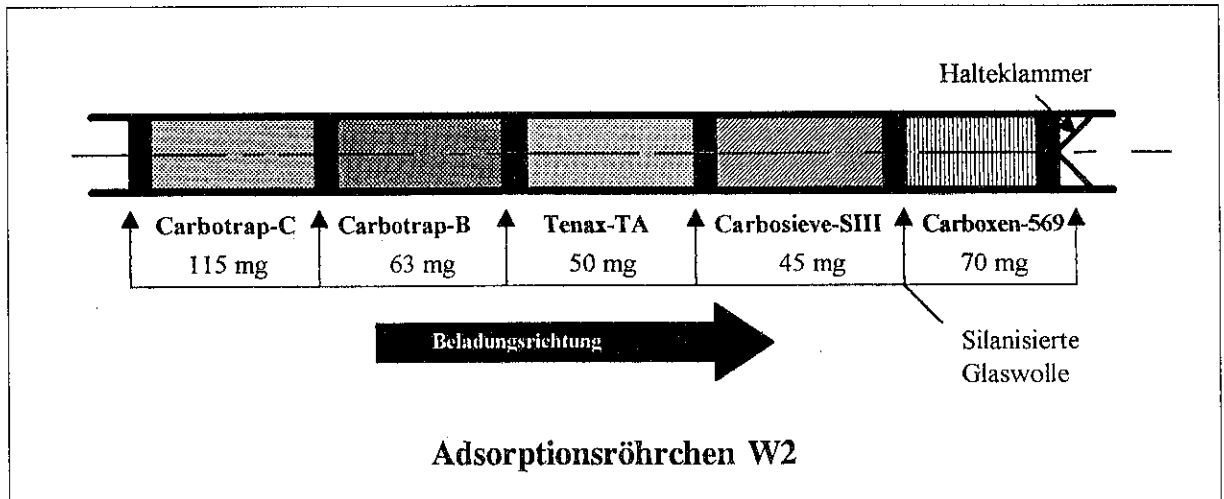
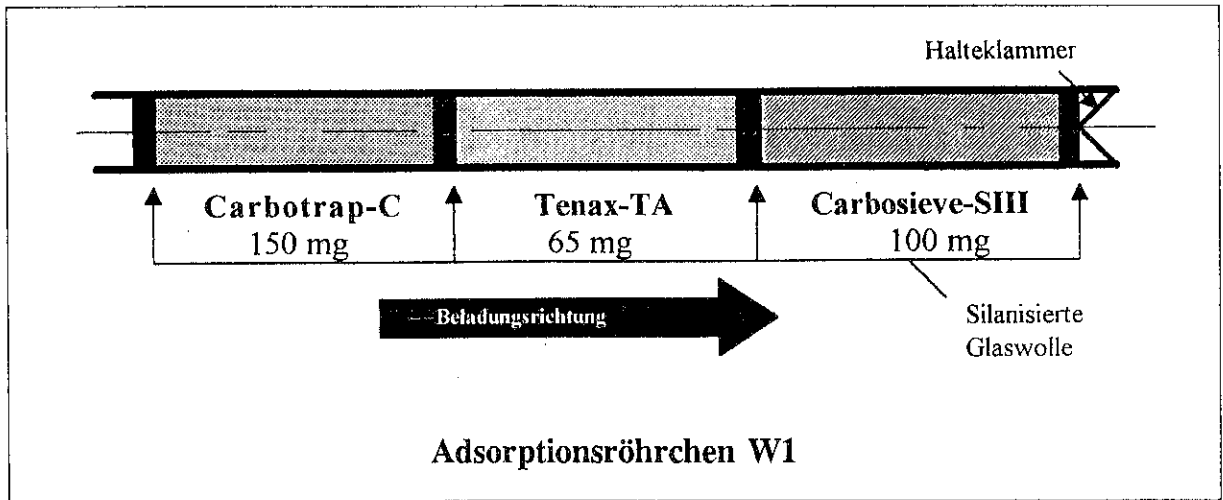


Bild 3: Die Probenahmeröhrchen W.1, W.2 und W.3 mit abgeänderter Adsorbentien-Kombination

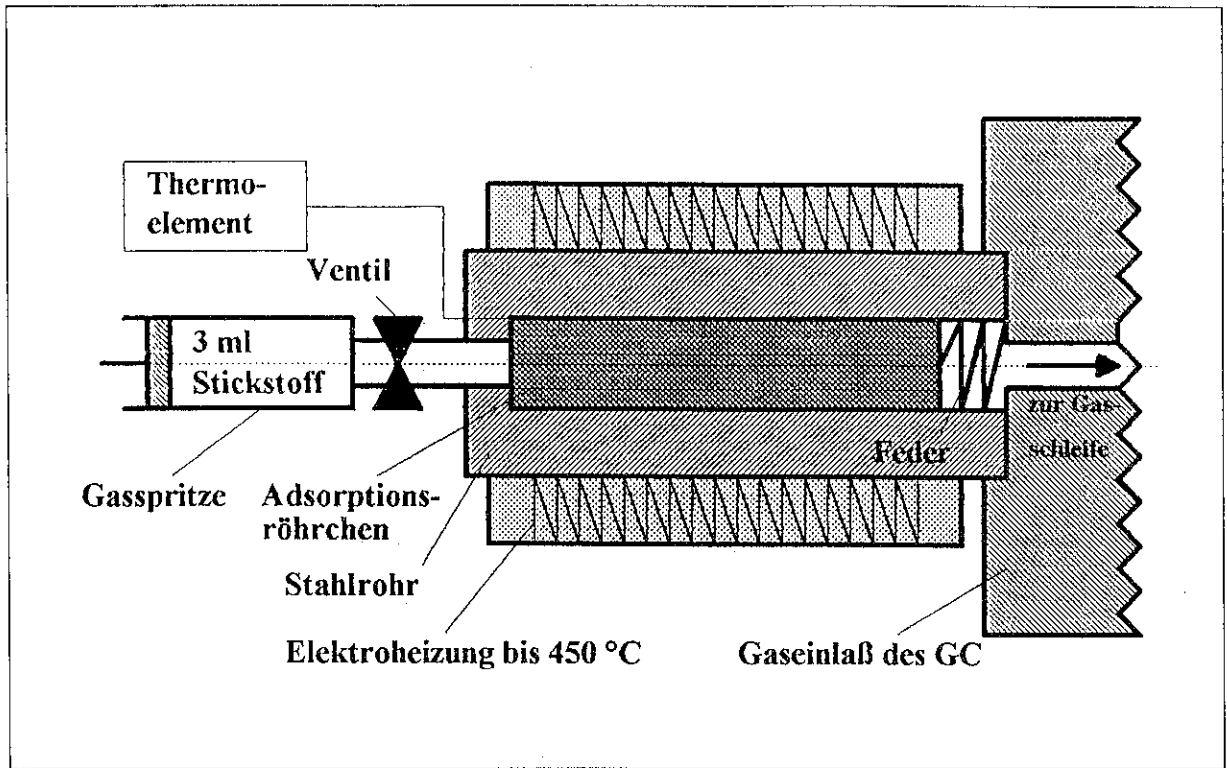


Bild 4: Der Aufbau des Thermodesorbers

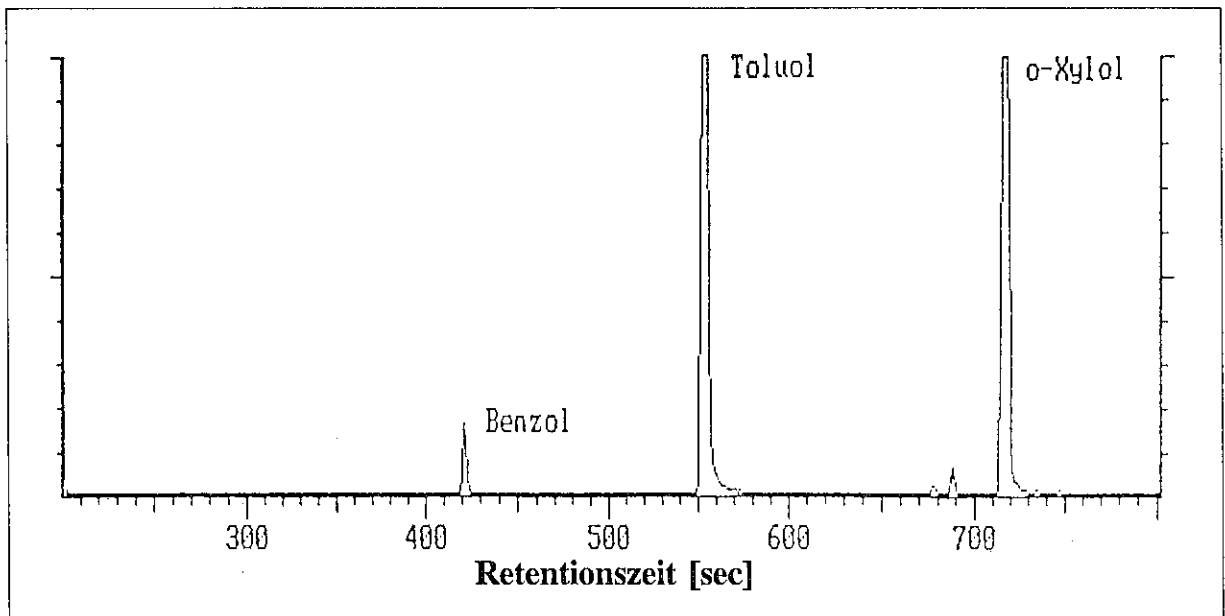


Bild 5: Das Chromatogramm eines Gemisches aus Benzol, Toluol und *o*-Xylol (BTX-Standard)

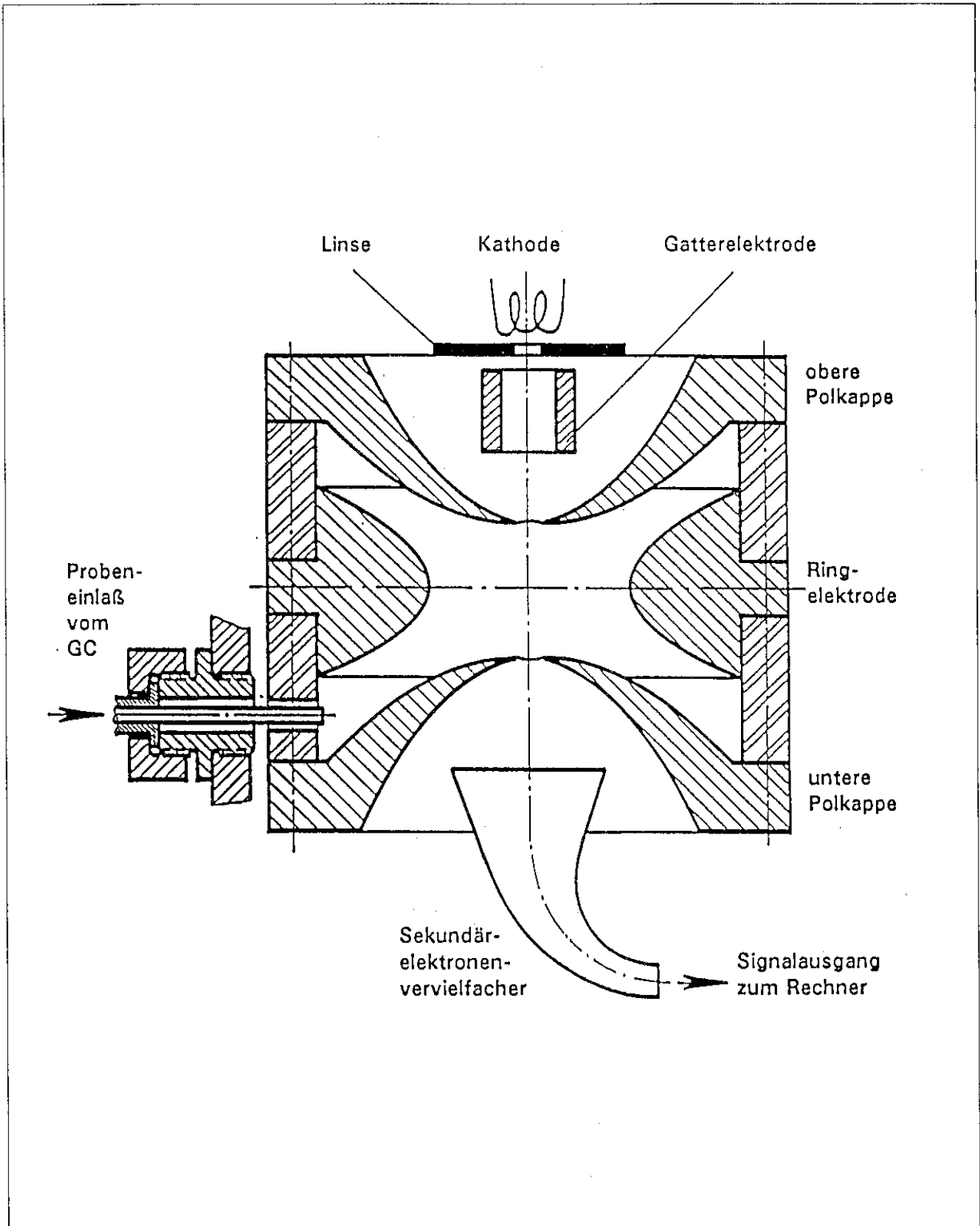


Bild 6: Der Ion-Trap-Detector™

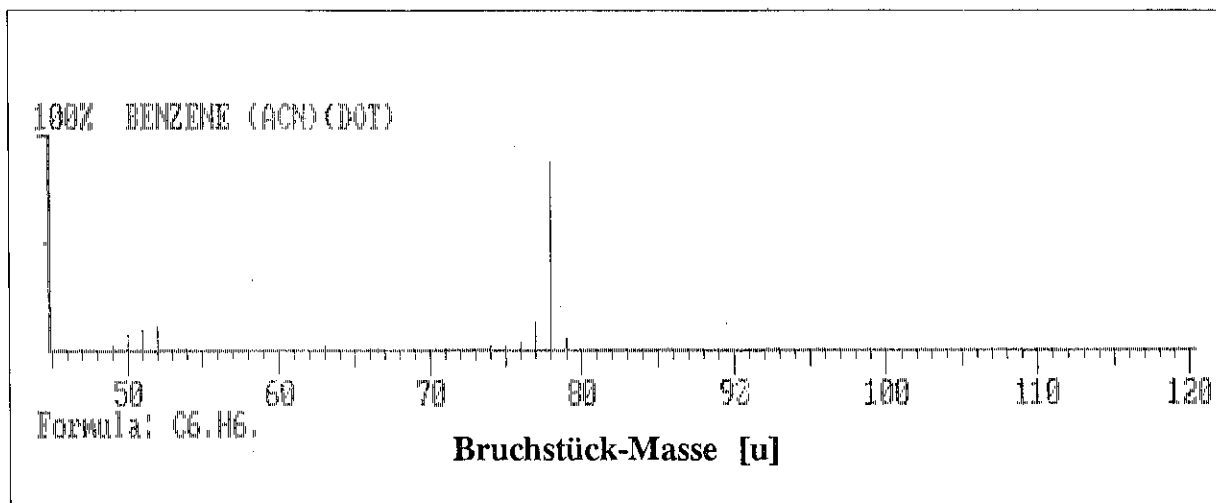


Bild 7: Das Massenspektrum von Benzol in der NIST-Bibliothek [24]

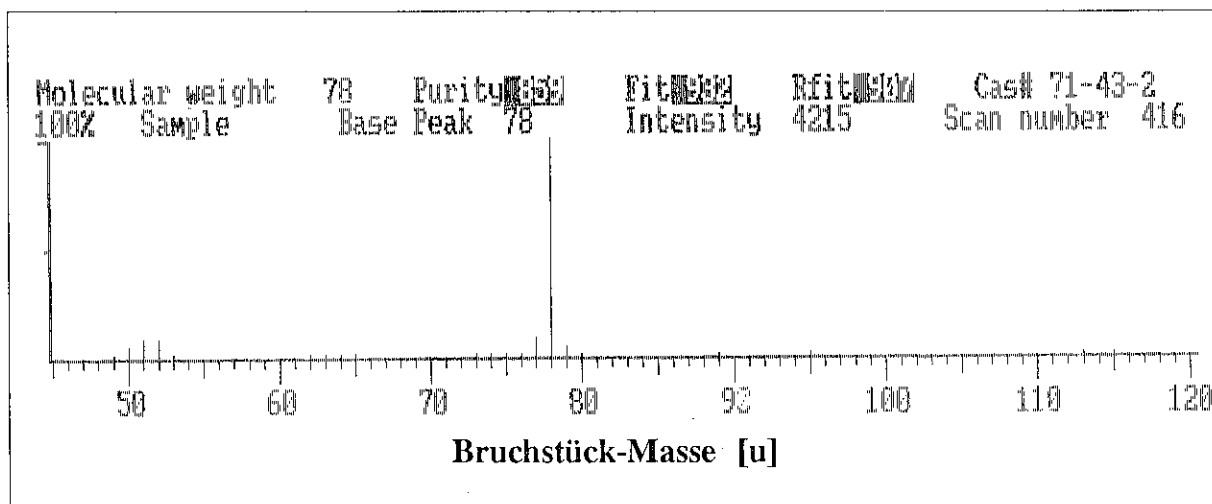


Bild 8: Ein selbst gemessenes Massenspektrum von Benzol

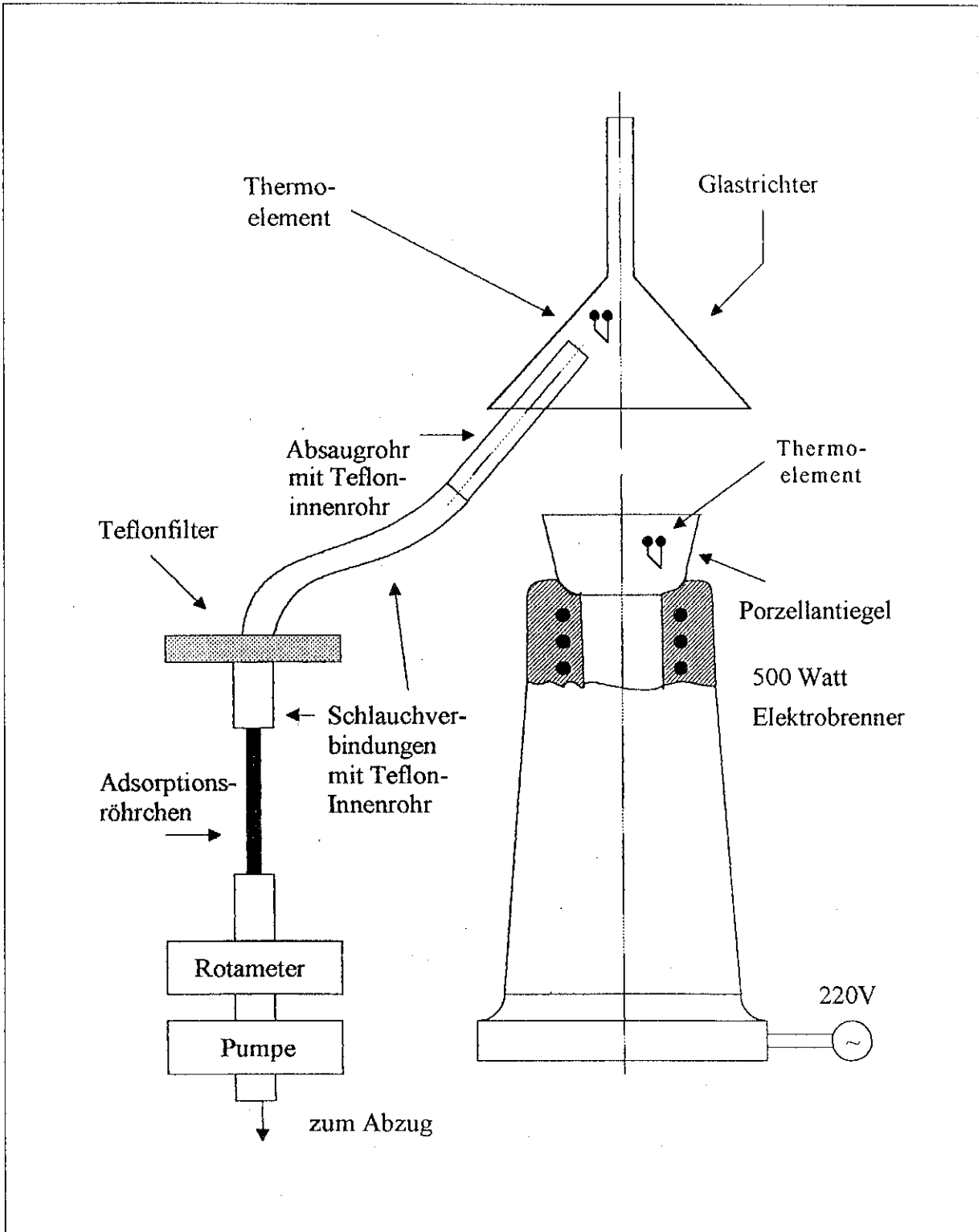


Bild 9: Der Versuchsaufbau für die Vorversuche

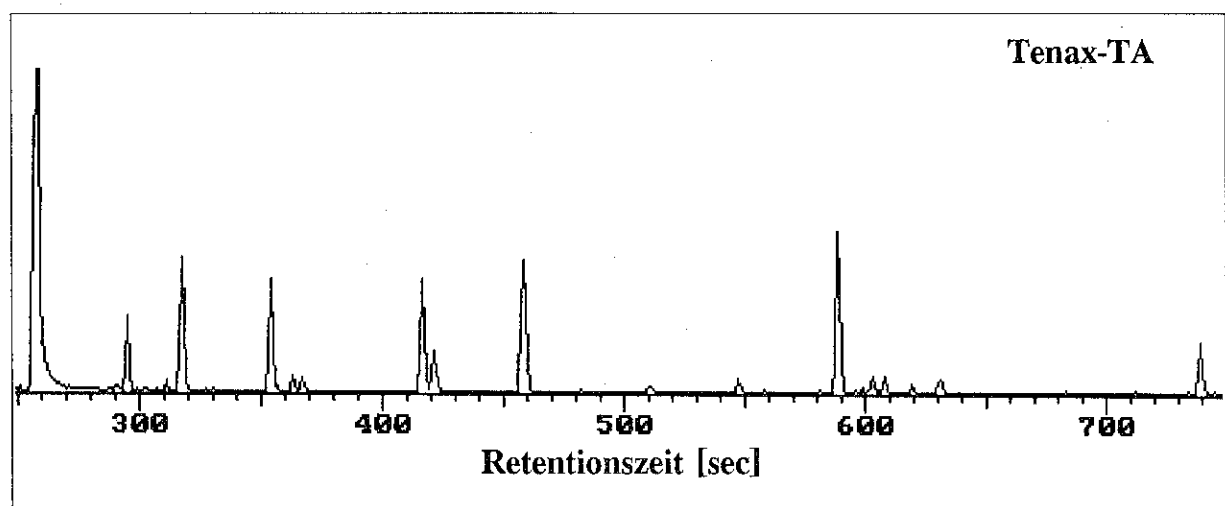
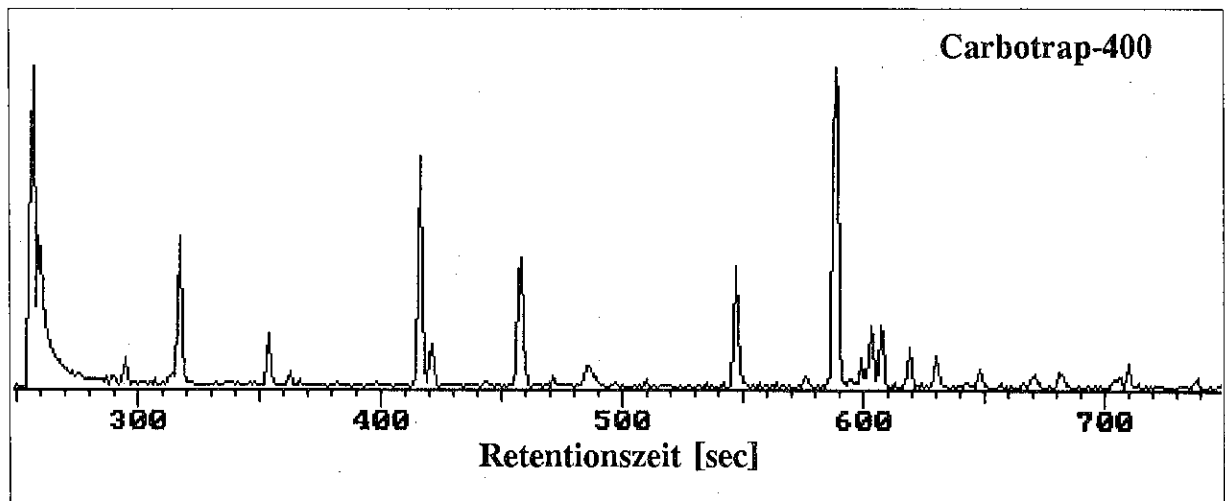
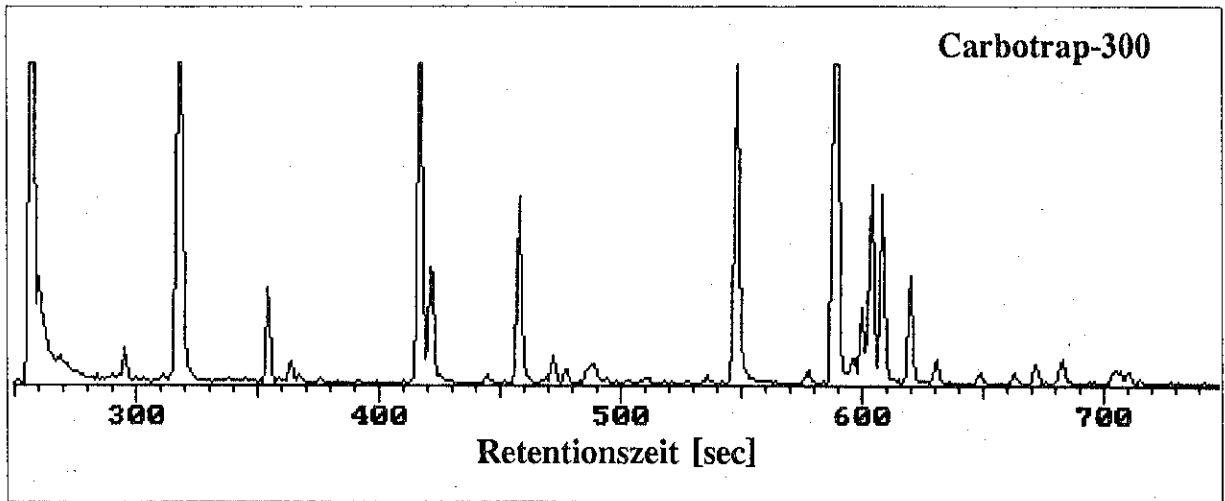


Bild 10: Die Chromatogramme von **Lentagran WP**-Brandgasen, angereichert auf Carbotrap-300-, Carbotrap-400- und Tenax-TA-Adsorptionsröhrchen

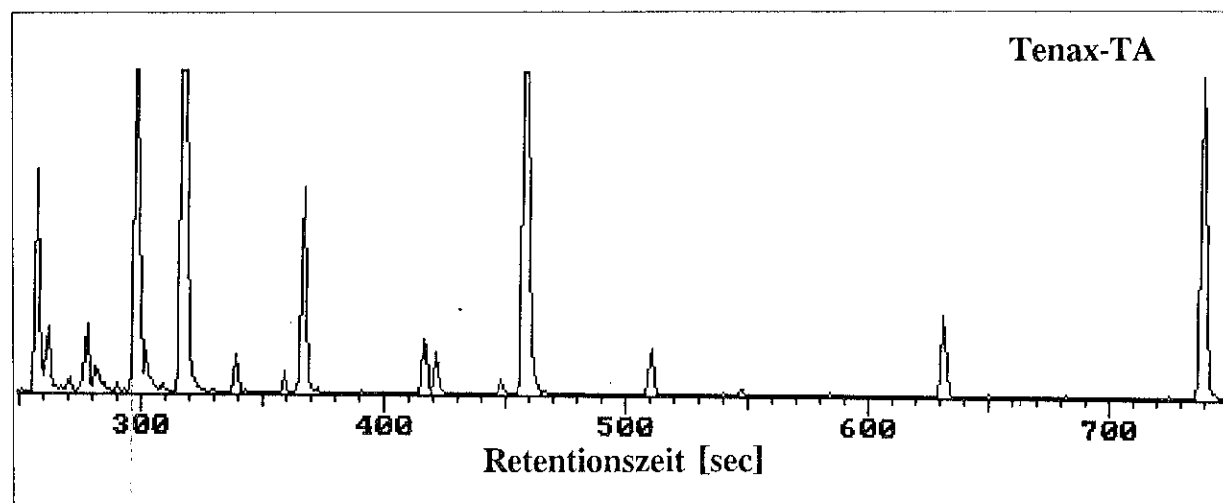
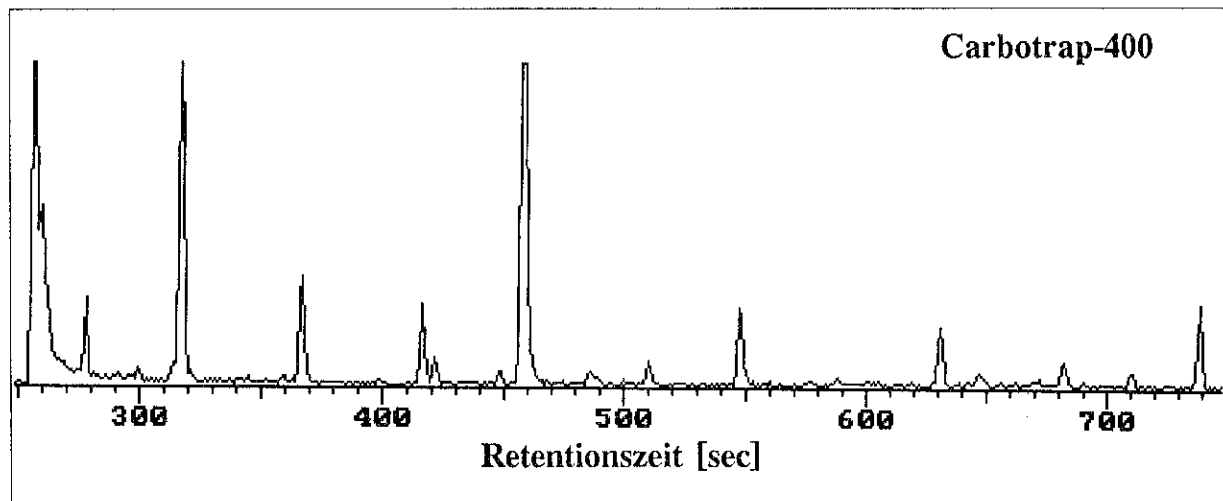
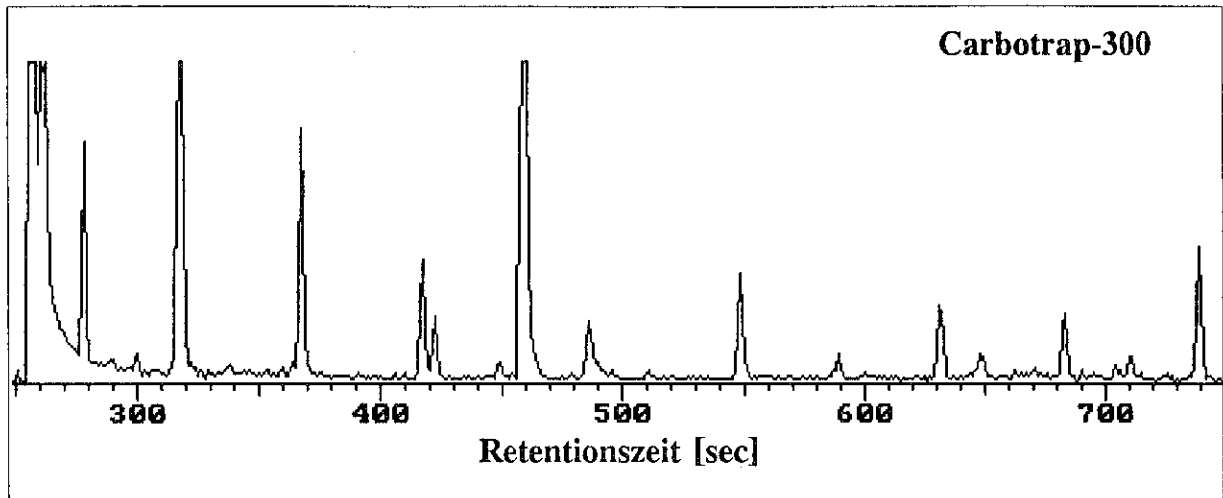


Bild 11: Die Chromatogramme von Rubitox-Brandgasen, angereichert auf Carbotrap-300-, Carbotrap-400- und Tenax-TA-Adsorptionsröhrchen

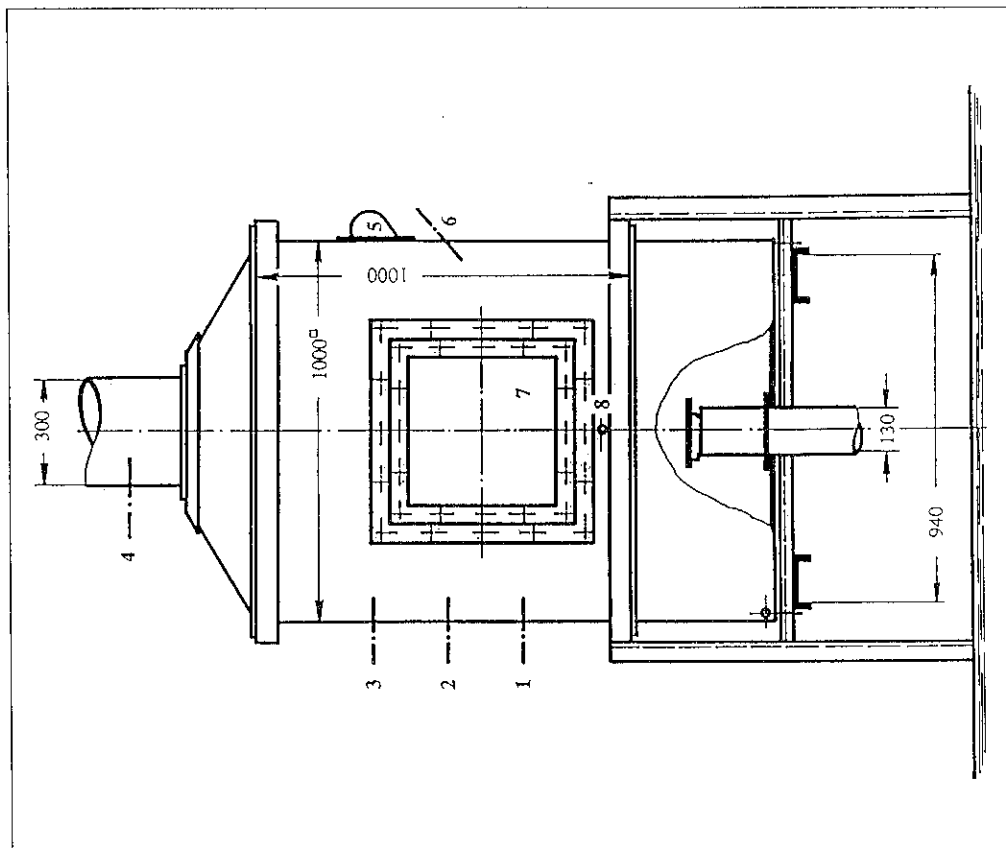


Bild 12: Der Versuchstand für Verbrennungsversuche im kg-Bereich: 1...4 = Probenahmestellen, 5 = Beleuchtung, 6 = Durchlaß für Löschrohr, 7 = wärmebeständiges Fenster, 8 = Durchlaß für Zündfackel

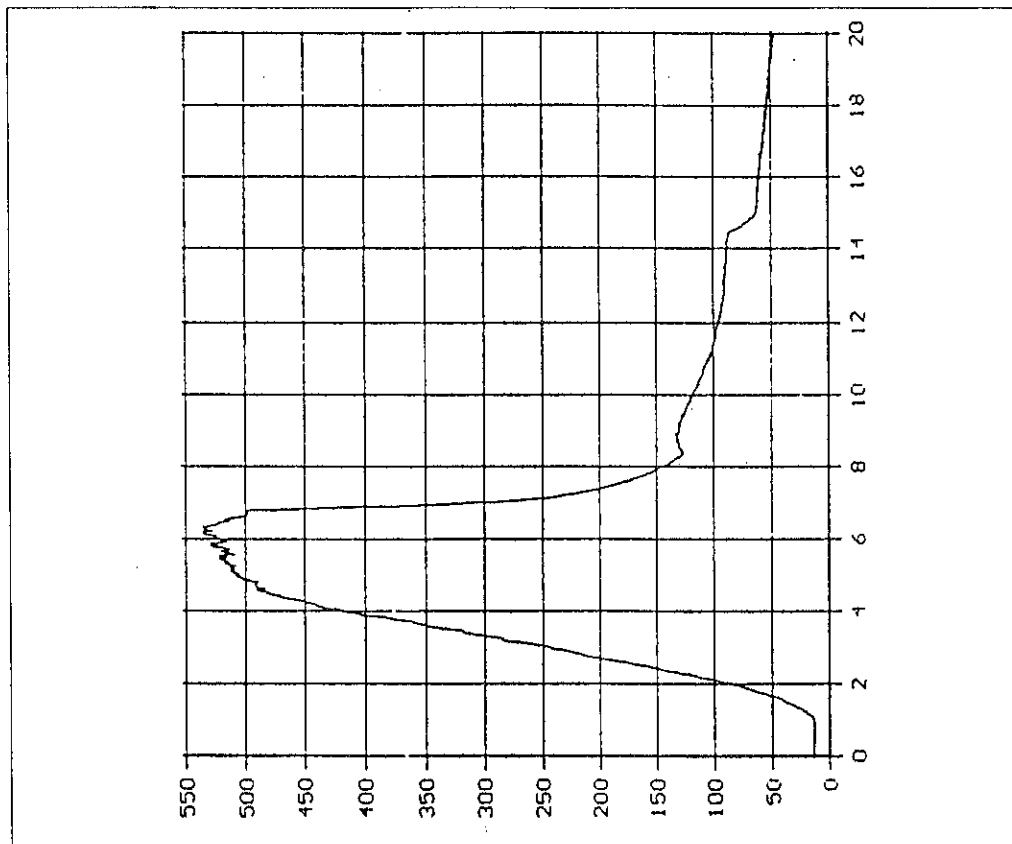


Bild 13: Der Verlauf der Temperatur [°C] an der Meßstelle 4 bei dem Brandversuch mit Lentagran WP aufgetragen über der Versuchsdauer [min]

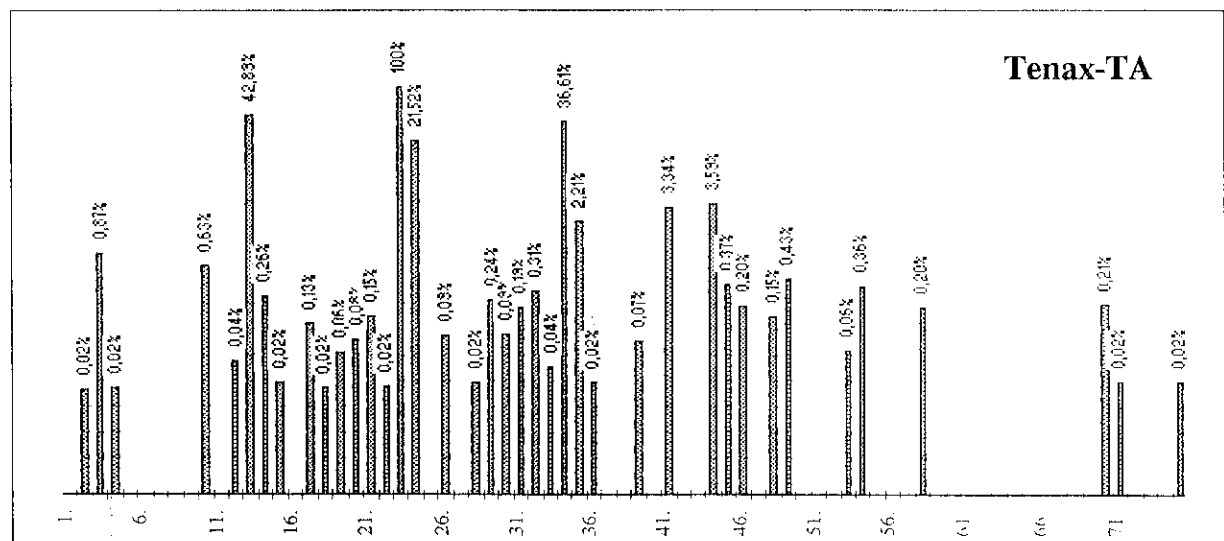
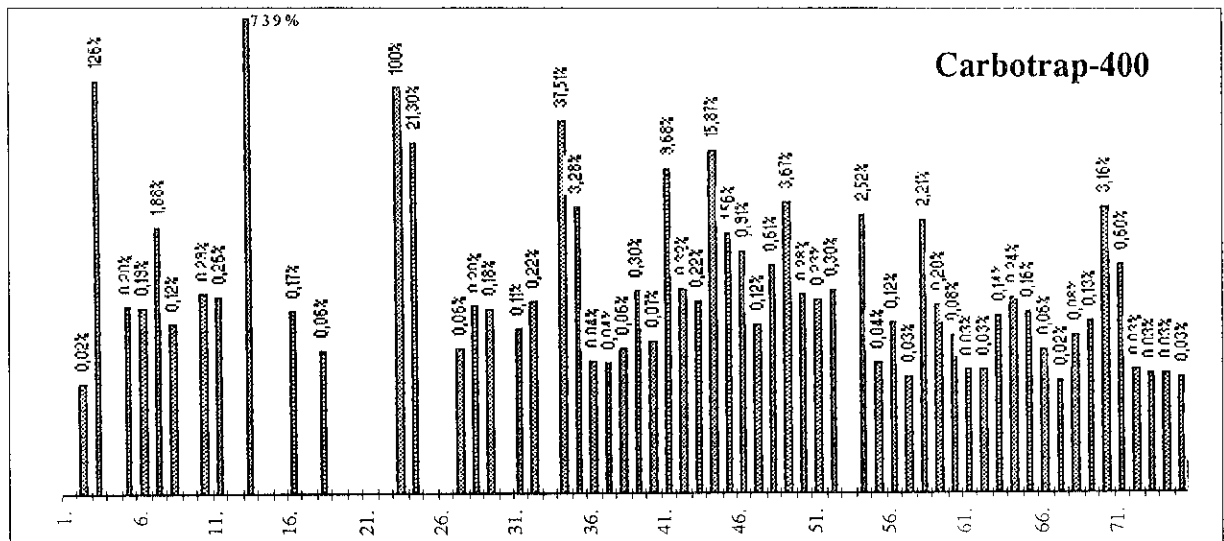
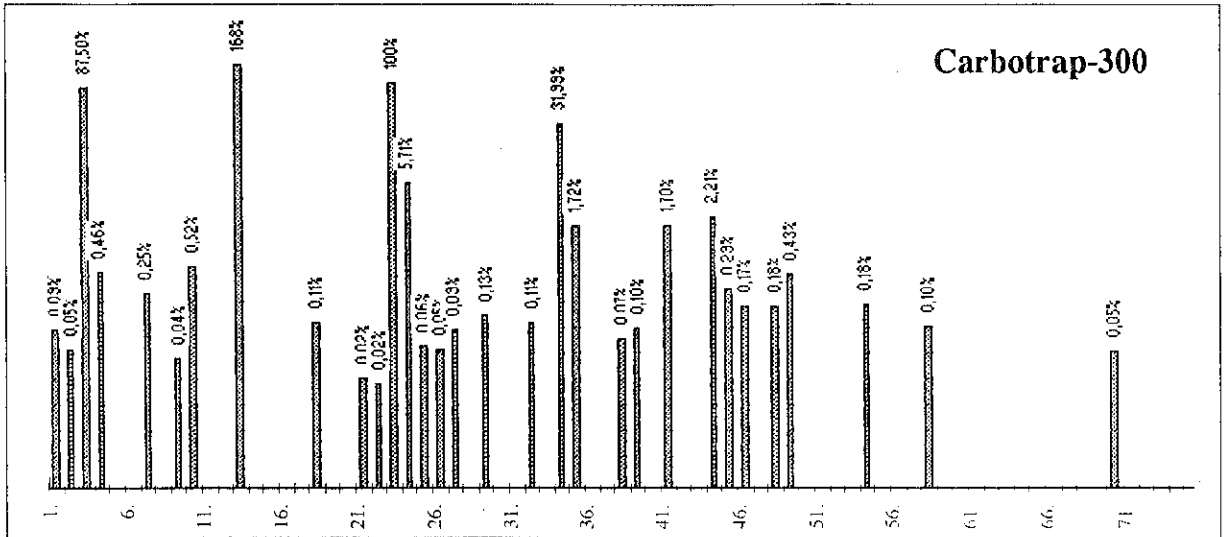


Bild 14: Die Peakflächen in den Chromatogrammen von Dithane Ultra WG bezogen auf die Fläche des jeweiligen Benzol-Peaks beim Einsatz verschiedener Adsorptionsröhrchen, aufgetragen über der Peak-Nummer

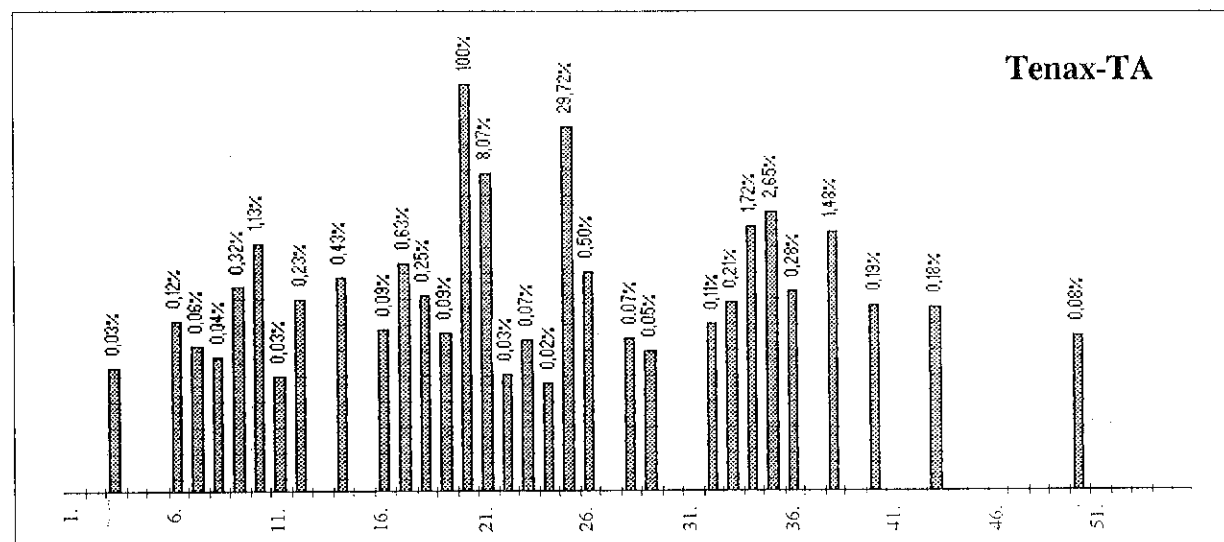
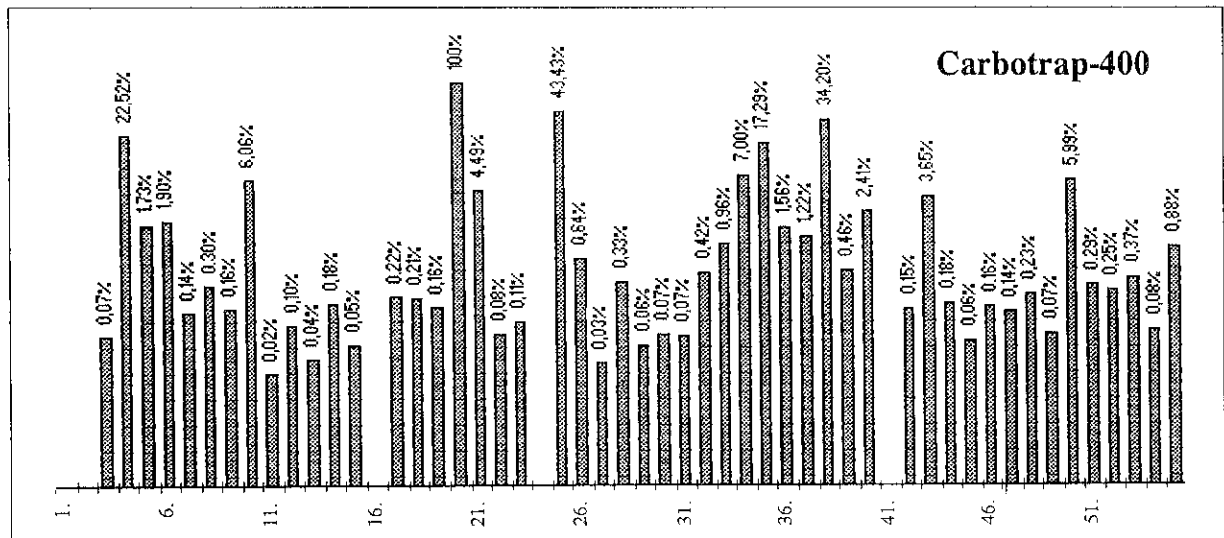
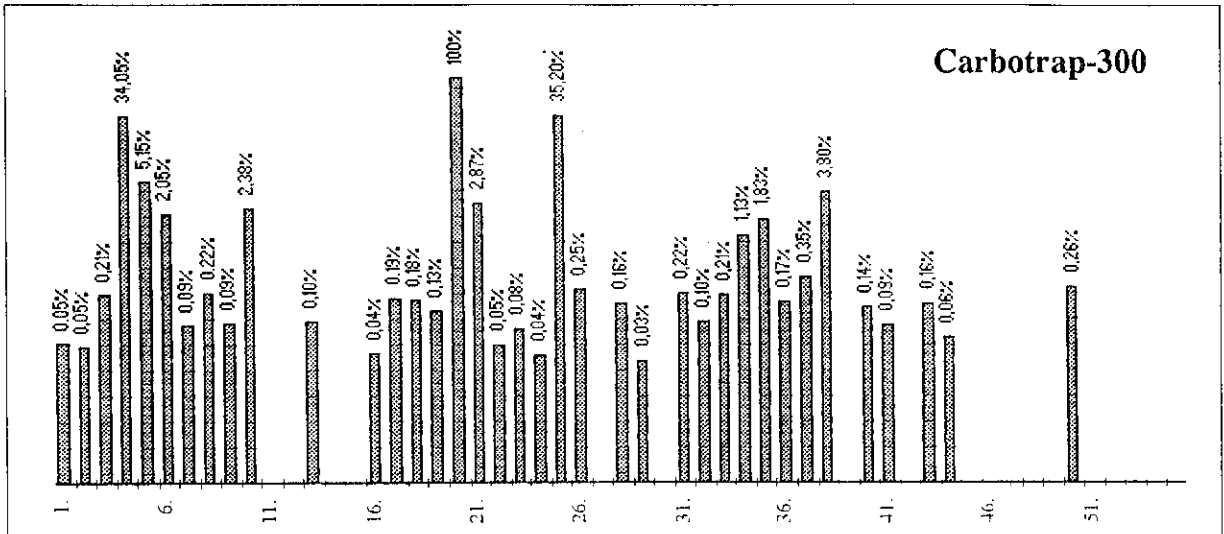


Bild 15: Die Peakflächen in den Chromatogrammen von **Lentagran WP** bezogen auf die Fläche des jeweiligen Benzol-Peaks beim Einsatz verschiedener Adsorptionsröhrchen, aufgetragen über der Peak-Nummer

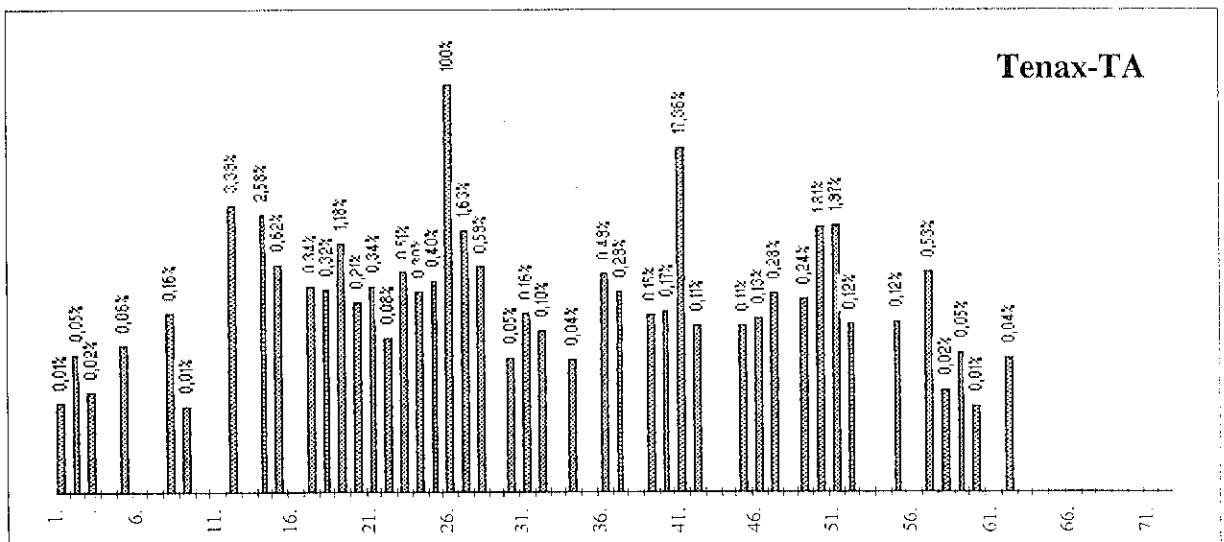
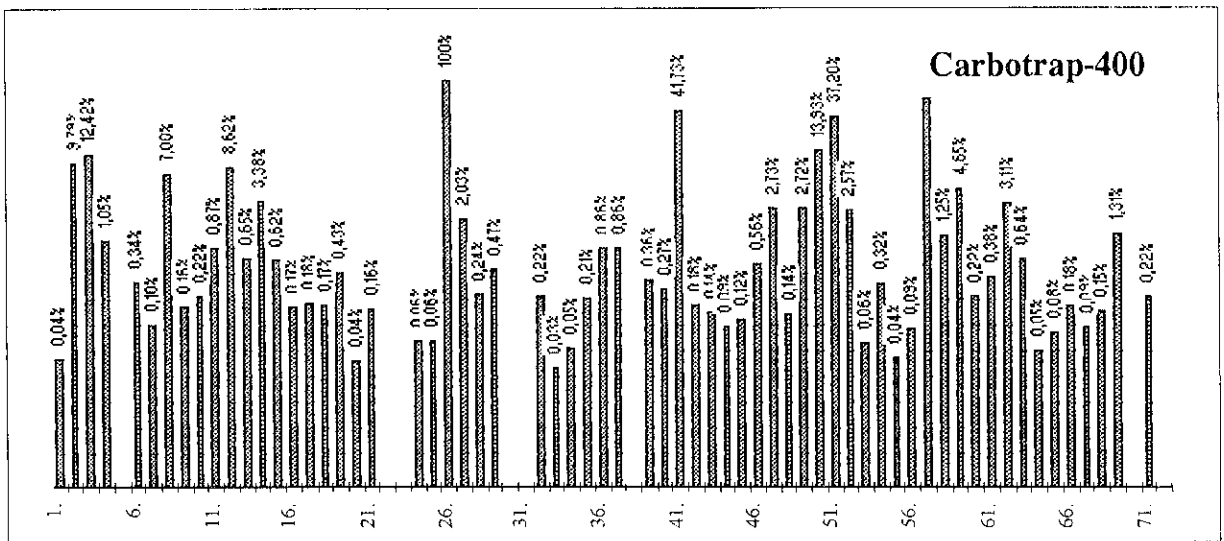
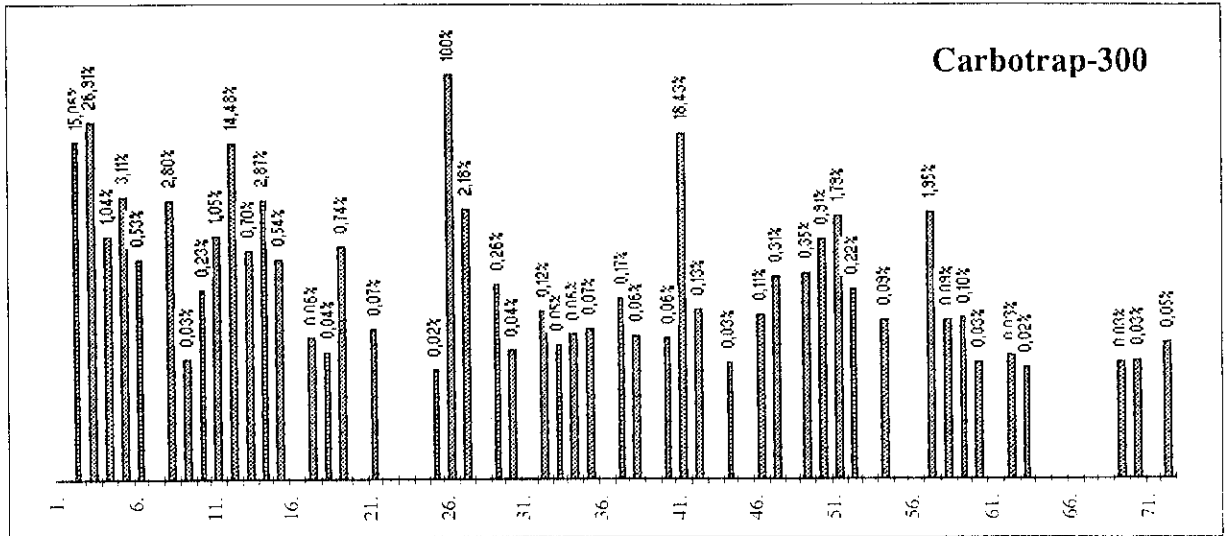


Bild 16: Die Peakflächen in den Chromatogrammen von Pyramin WG bezogen auf die Fläche des jeweiligen Benzol-Peaks beim Einsatz verschiedener Adsorptionsröhrchen, aufgetragen über der Peak-Nummer

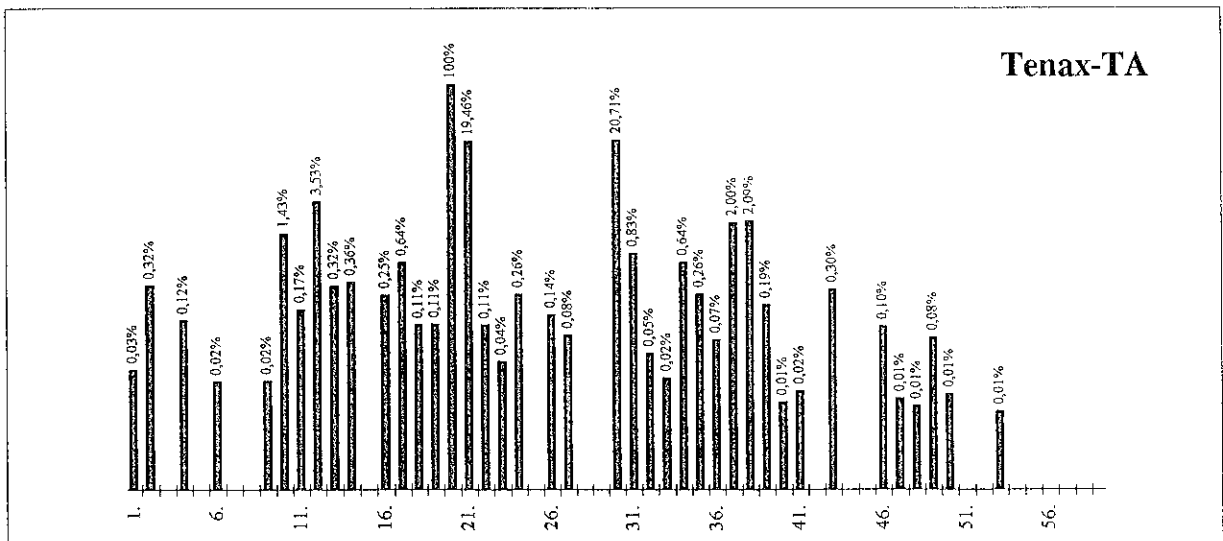
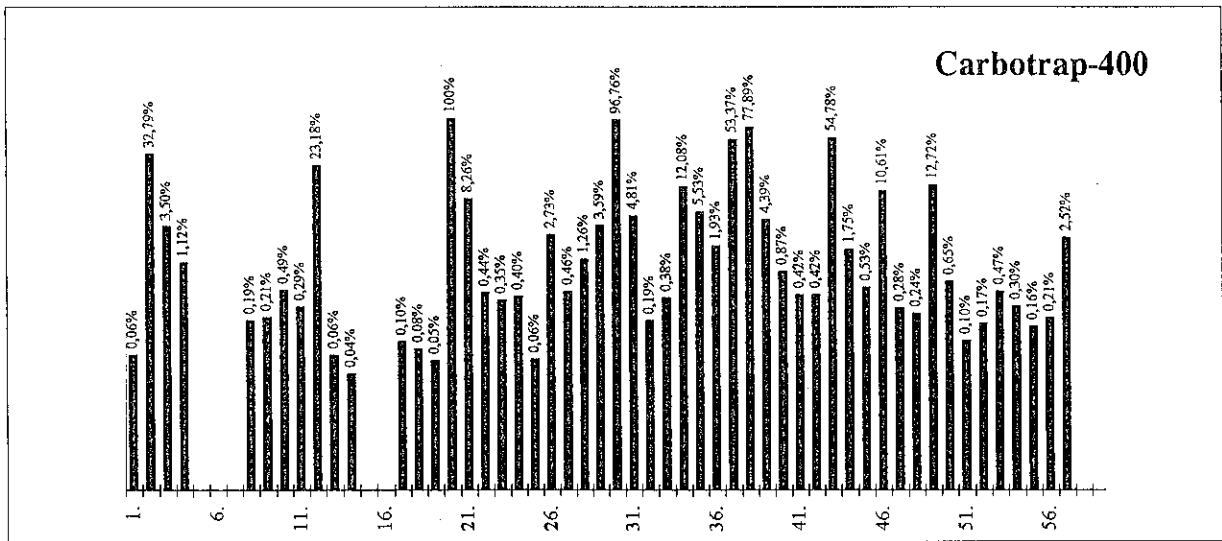
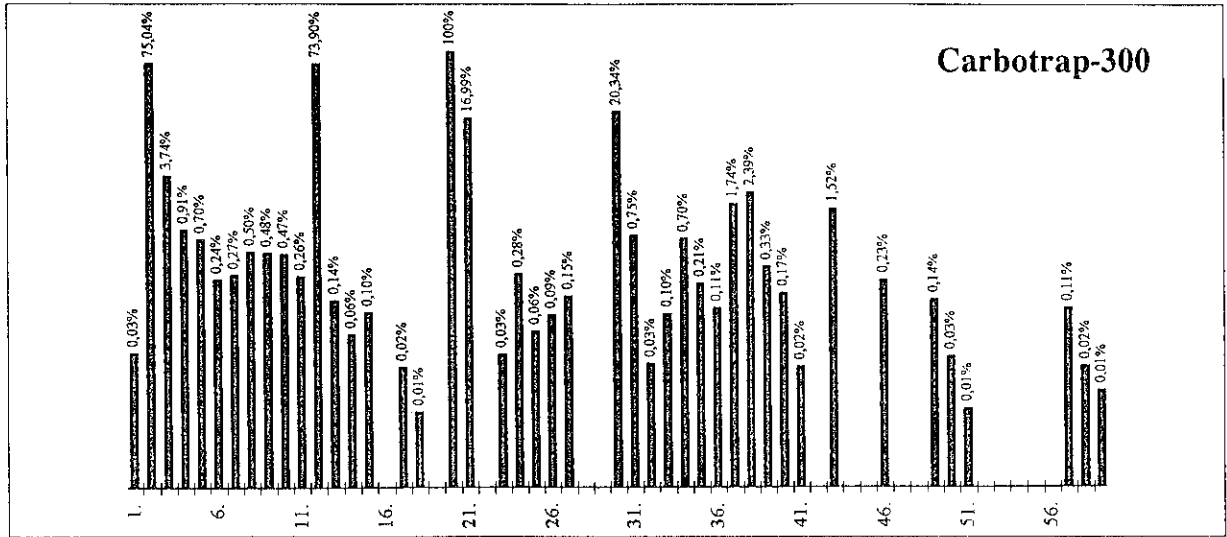


Bild 17: Die Peakflächen in den Chromatogrammen von **Rubitox** bezogen auf die Fläche des jeweiligen Benzol-Peaks beim Einsatz verschiedener Adsorptionsröhrchen, aufgetragen über der Peak-Nummer

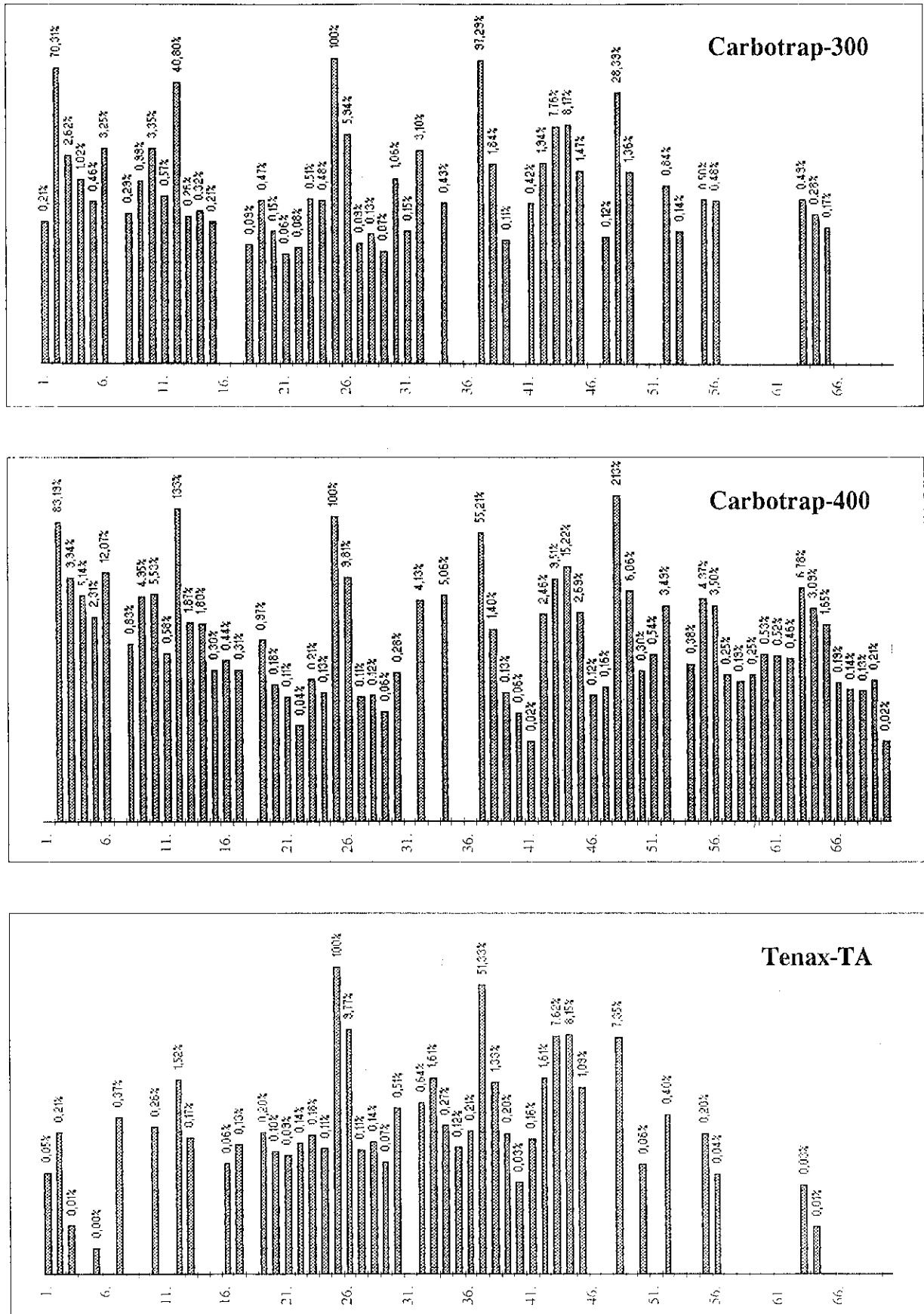
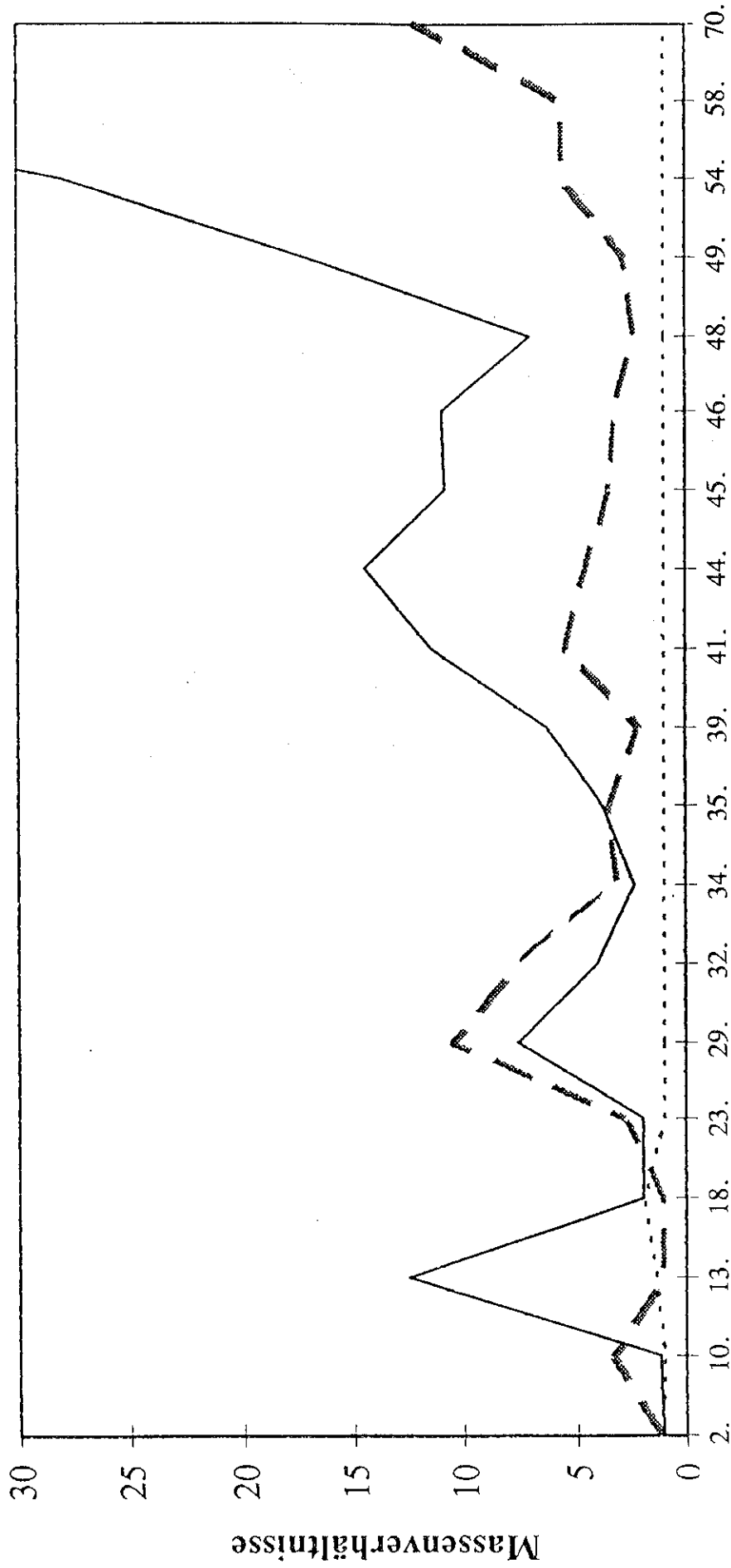
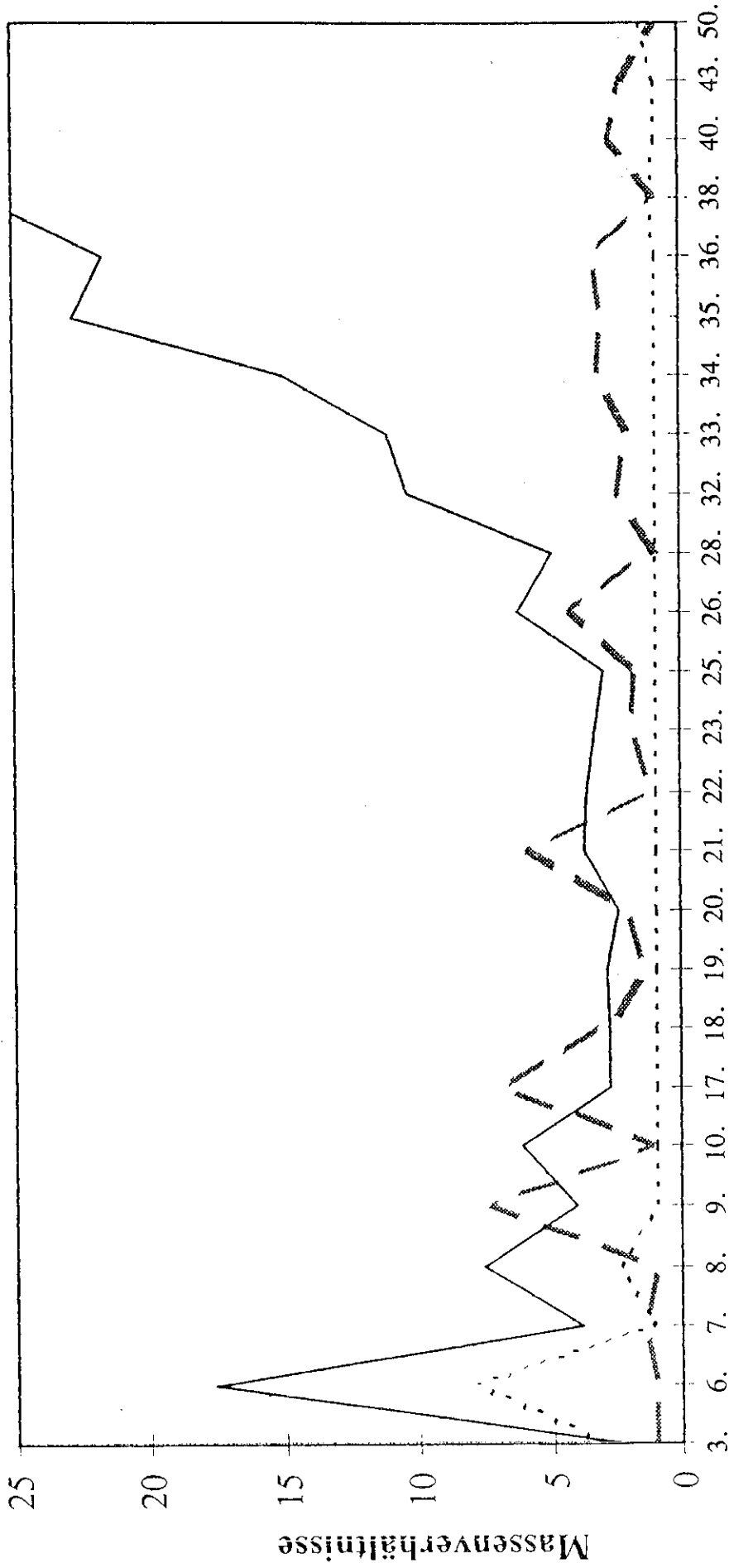


Bild 18: Die Peakflächen in den Chromatogrammen von **Tribunil** bezogen auf die Fläche des jeweiligen Benzol-Peaks beim Einsatz verschiedener Adsorptionsröhrchen, aufgetragen über der Peak-Nummer



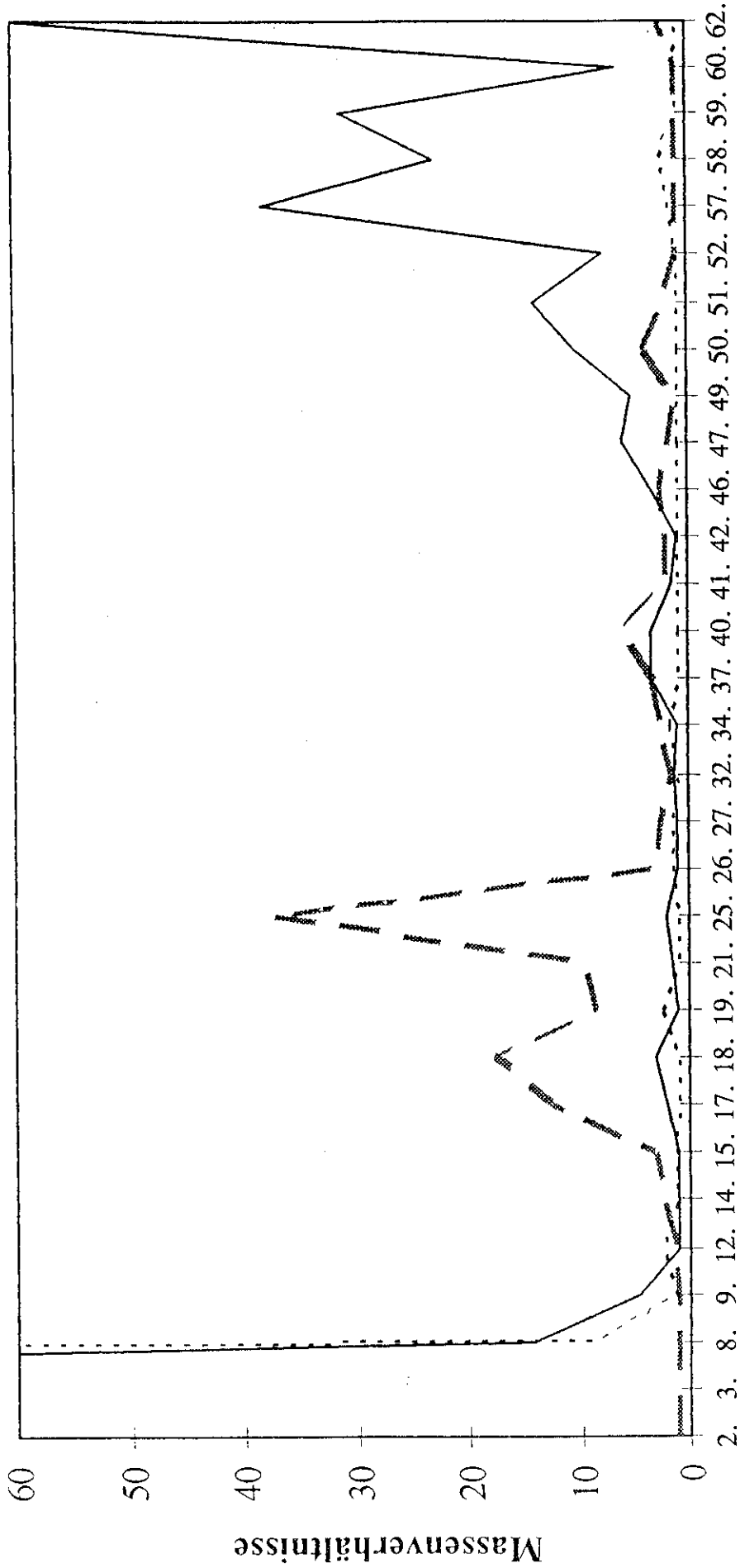
Peak-Nummer nach den Tabellen 8...10

Bild 19: Die Verhältnisse der von Carbotrap-300 (.....), Carbotrap-400 (—) und von Tenax-TA (- - -) adsorbierten Massen der Brandgaskomponenten von Dithane Ultra WG, aufgetragen über ihrer Peak-Nummer



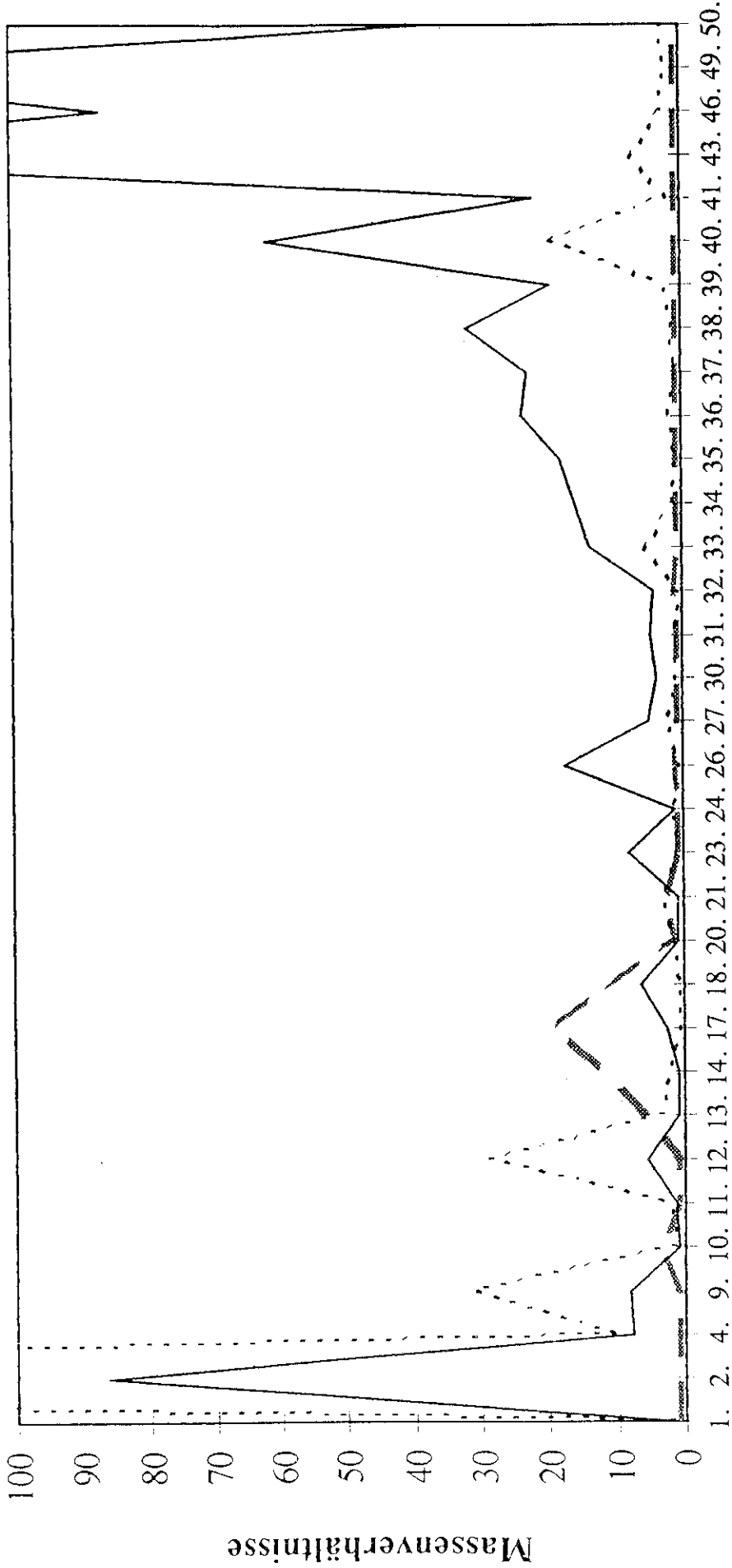
Peak-Nummer nach den Tabellen 11...13

Bild 20: Die Verhältnisse der von Carbotrap-300 (.....), Carbotrap-400 (—) und von Tenax-TA (---) adsorbierten Massen der Brandgaskomponenten von Lentagran WP, aufgetragen über ihrer Peak-Nummer



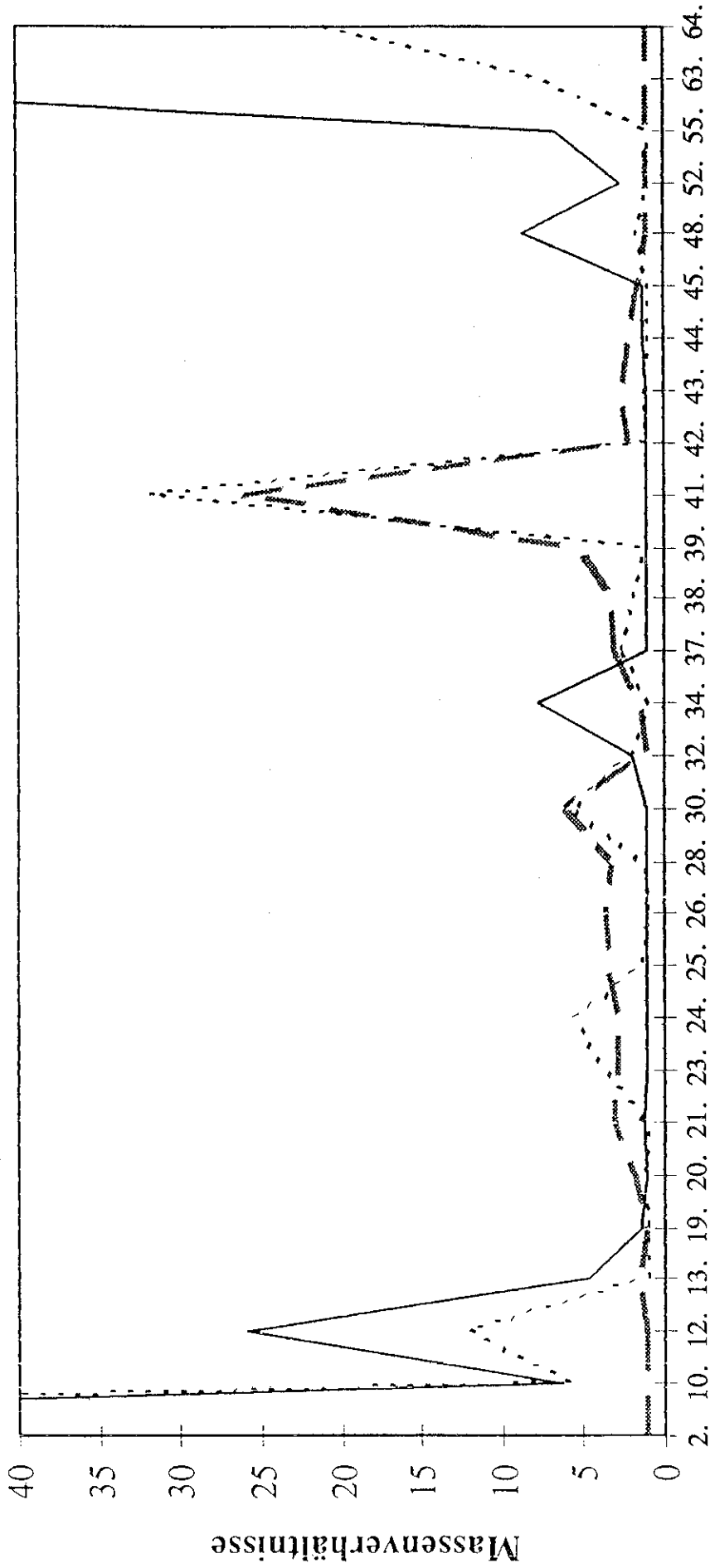
Peak-Nummer nach den Tabellen 14...16

Bild 21: Die Verhältnisse der von Carbotrap-300 (.....), Carbotrap-400 (—) und von Tenax-TA (---) adsorbierten Massen der Brandgaskomponenten von Pyramin WG, aufgetragen über ihrer Peak-Nummer



Peak-Nummer nach den Tabellen 17...19

Bild 22: Die Verhältnisse der von Carbotrap-300 (.....), Carbotrap-400 (——) und von Tenax-IA (---) adsorbierten Massen der Brandgaskomponenten von Rubitox, aufgetragen über ihrer Peak-Nummer



Peak-Nummer nach den Tabellen 20...22

Bild 23: Die Verhältnisse der von Carbotrap-300 (.....), Carbotrap-400 (—) und von Tenax-TA (---) adsorbierten Massen der Brandgaskomponenten von Tribunil, aufgetragen über ihrer Peak-Nummer

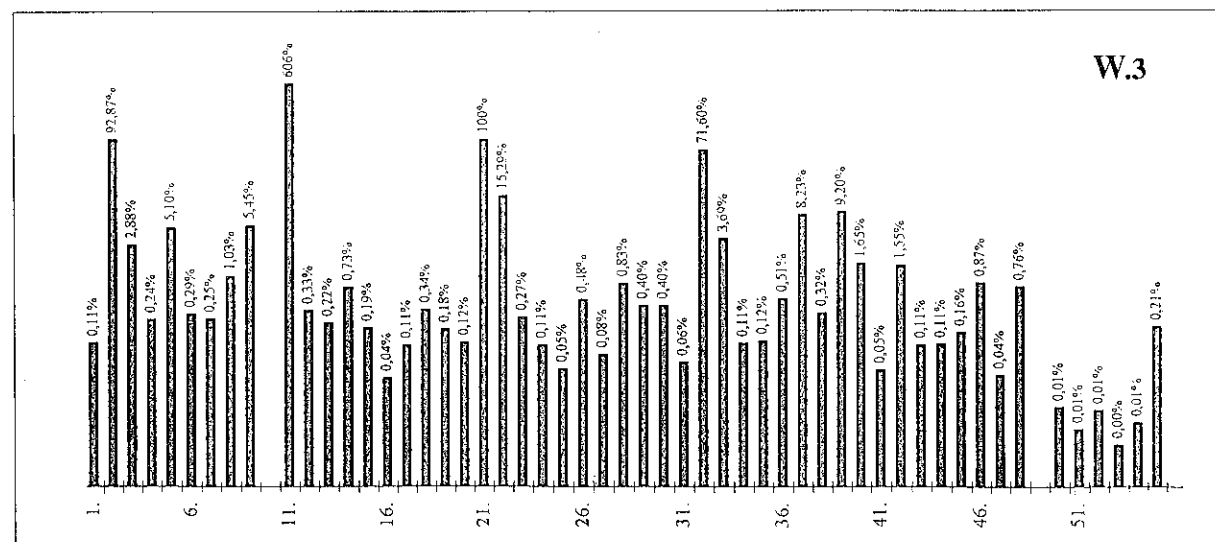
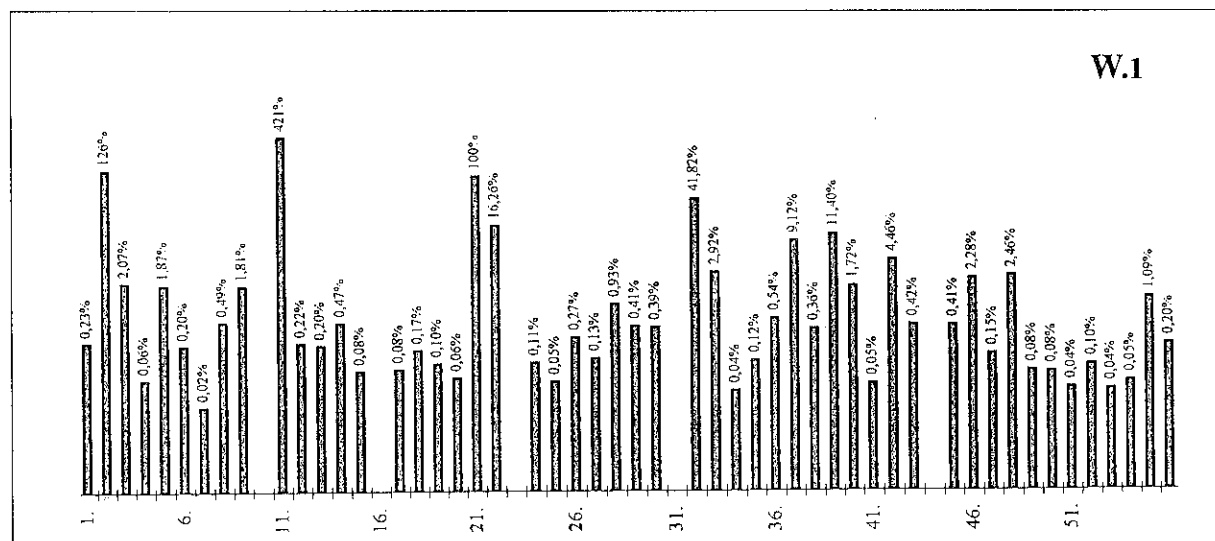
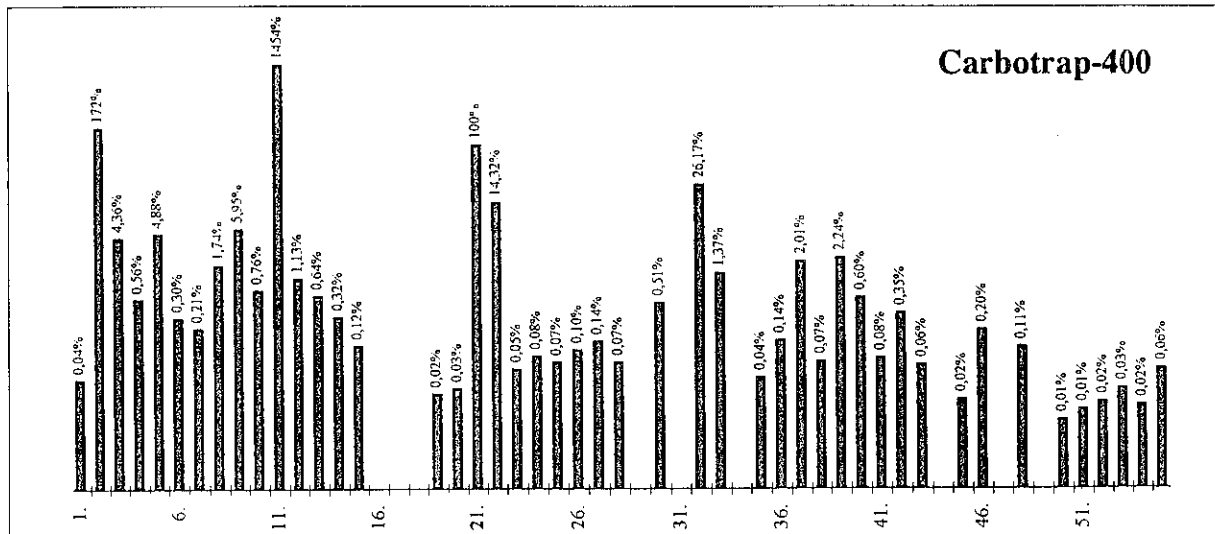


Bild 24: Die Peakflächen in den Chromatogrammen der zweiten Versuchsreihe mit Dithane Ultra WG bezogen auf die Fläche des jeweiligen Benzol-Peaks beim Einsatz verschiedener Adsorptionsröhrchen, aufgetragen über der Peak-Nummer

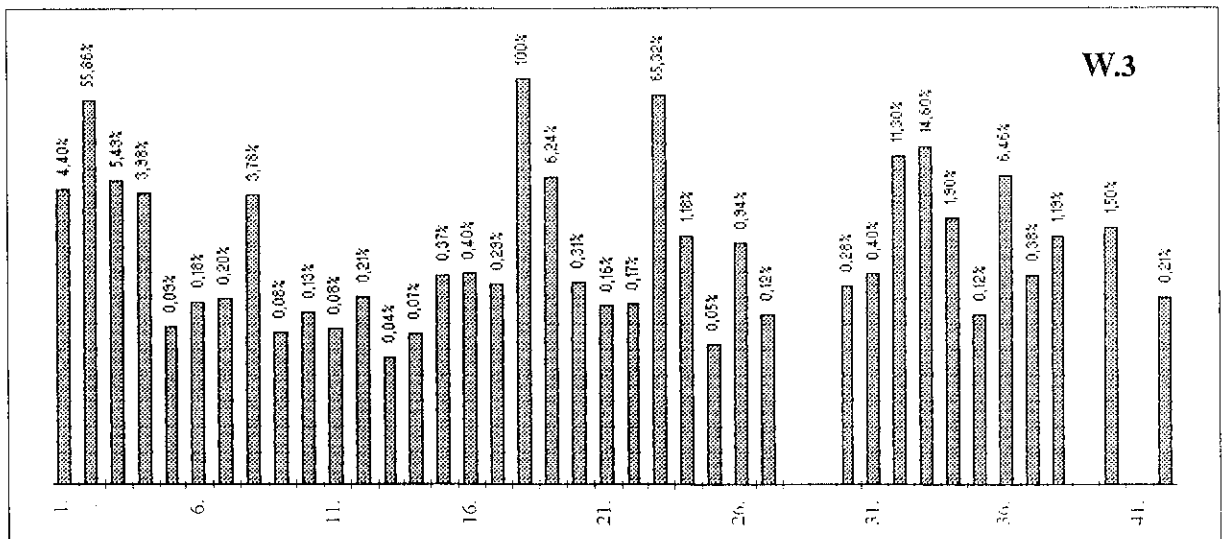
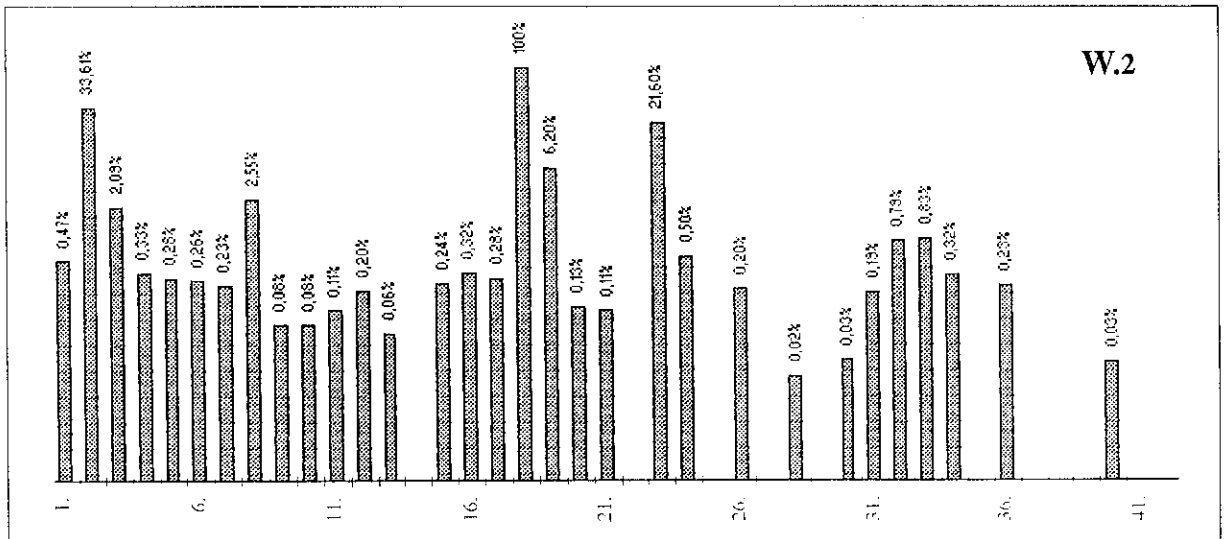
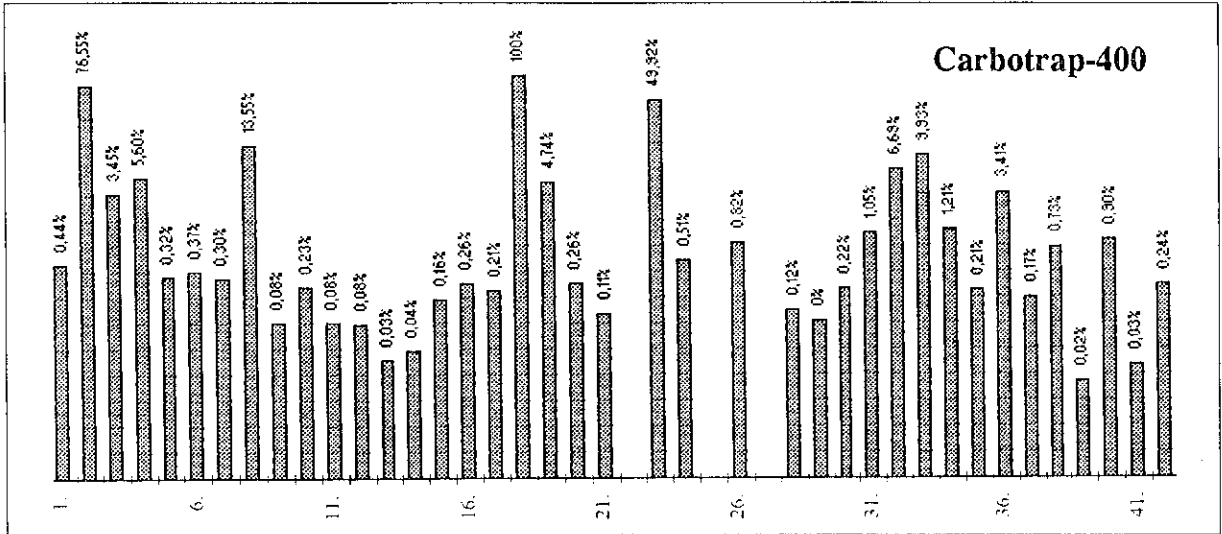


Bild 25: Die Peakflächen in den Chromatogrammen der zweiten Versuchsreihe mit **Lentagran WP** bezogen auf die Fläche des jeweiligen Benzol-Peaks beim Einsatz verschiedener Adsorptionsröhrchen, aufgetragen über der Peak-Nummer

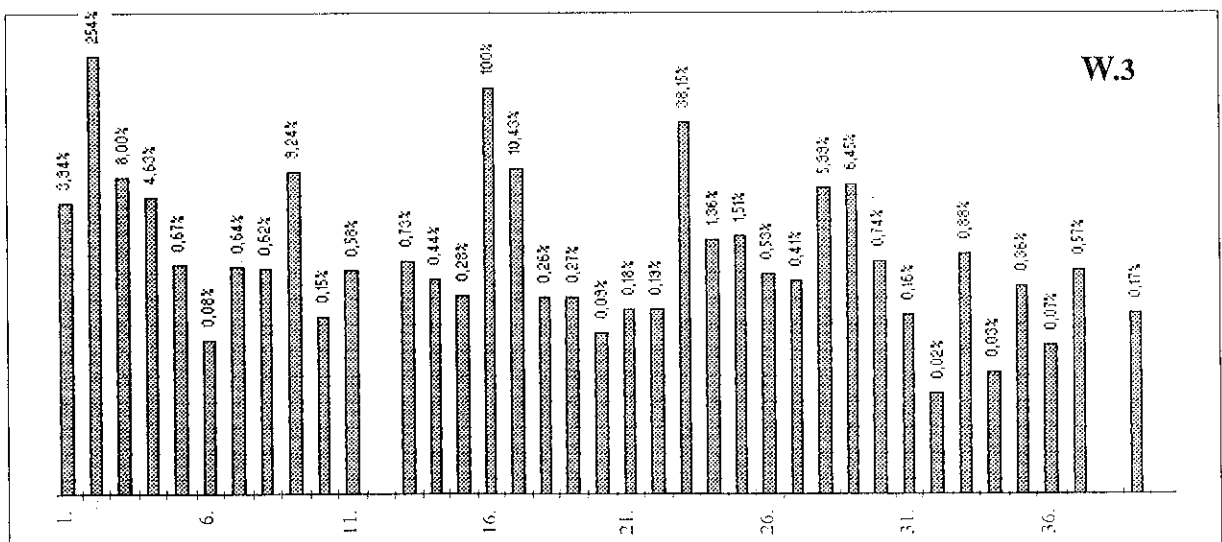
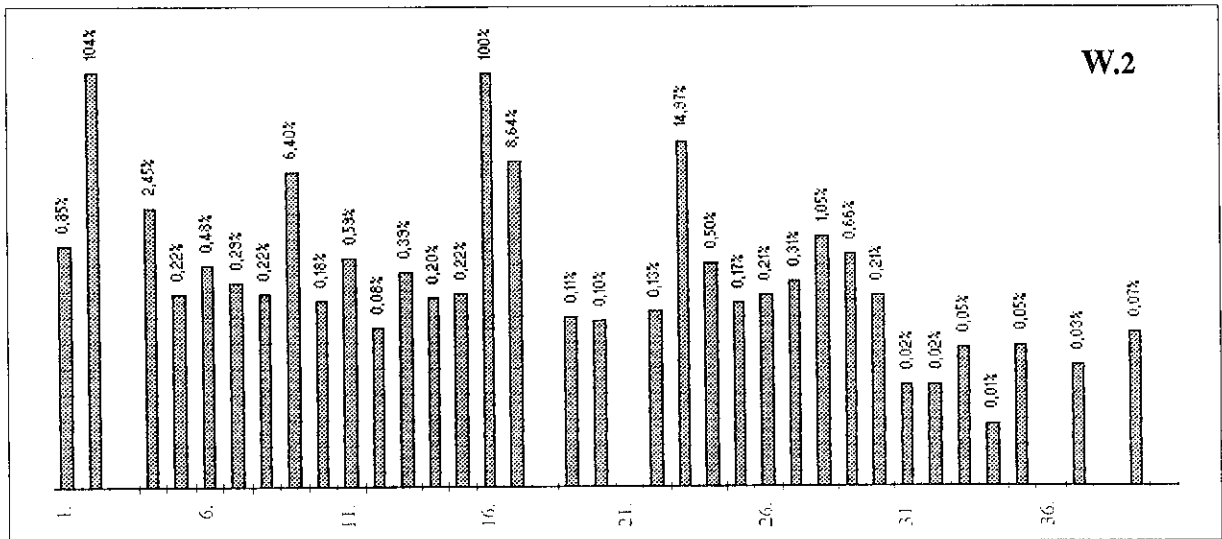
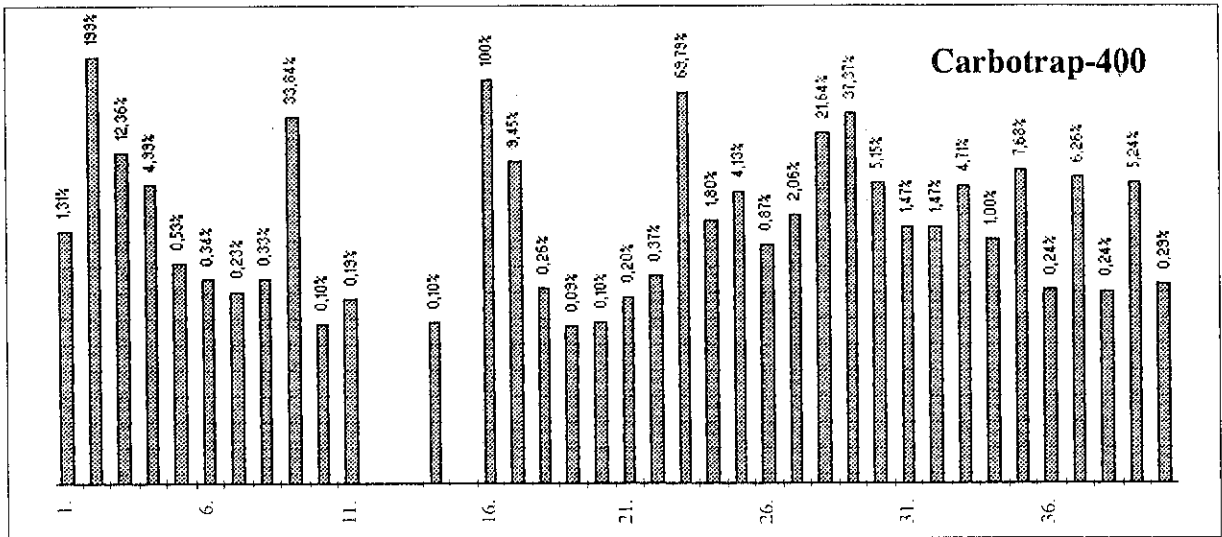


Bild 27: Die Peakflächen in den Chromatogrammen der zweiten Versuchsreihe mit **Rubitox** bezogen auf die Fläche des jeweiligen Benzol-Peaks beim Einsatz verschiedener Adsorptionsröhrchen, aufgetragen über der Peak-Nummer

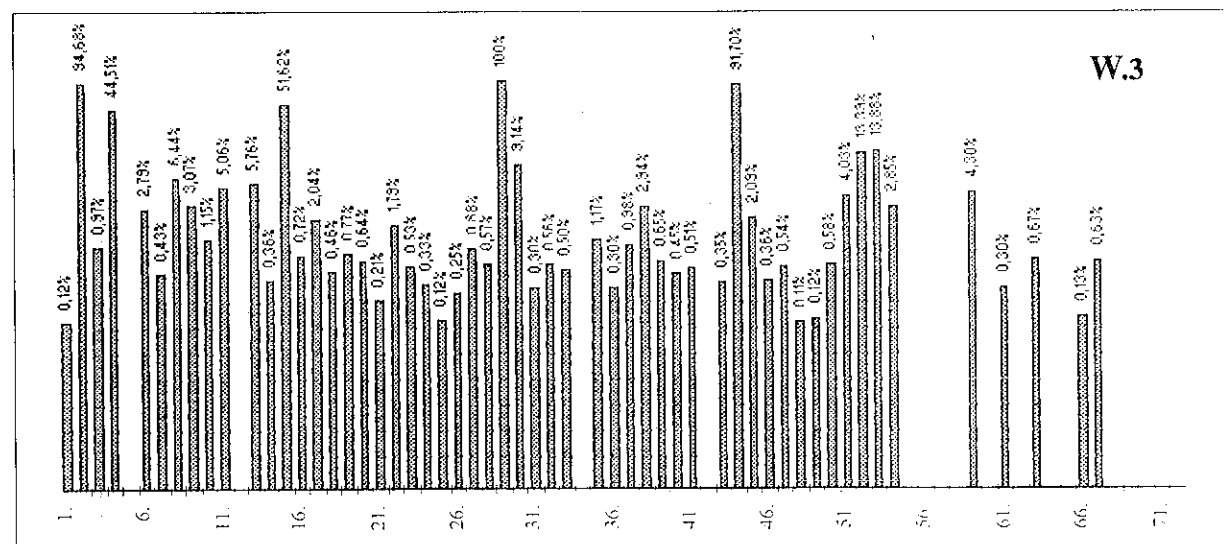
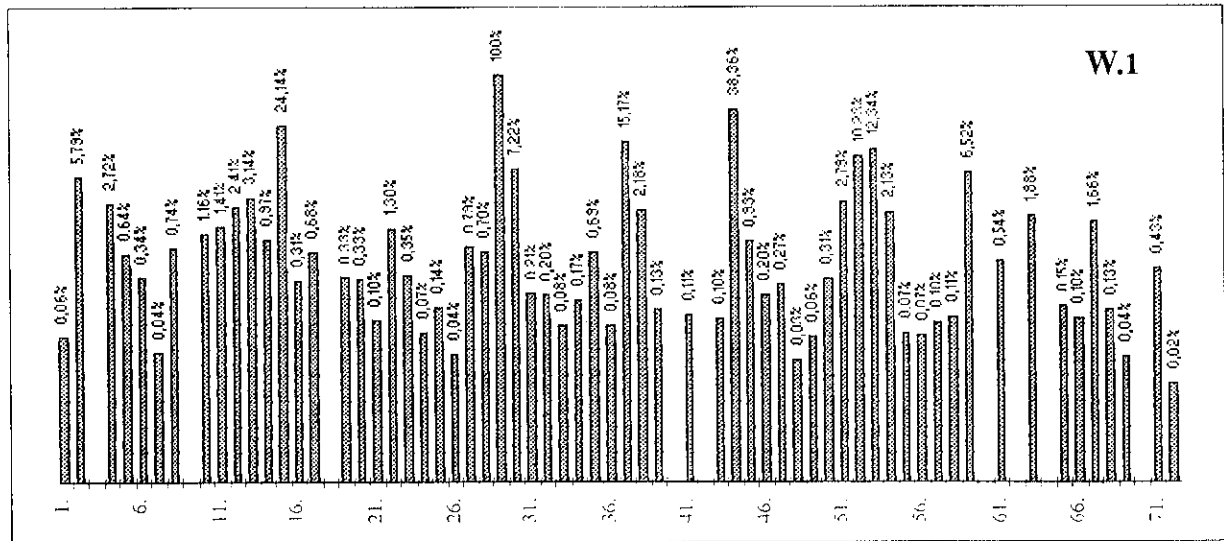
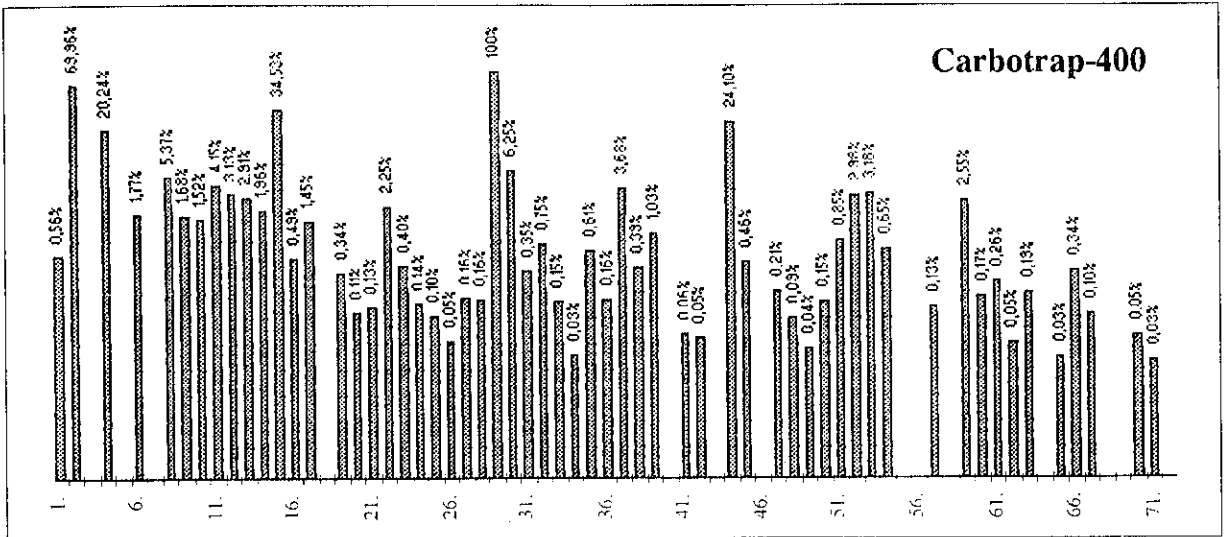


Bild 28: Die Peakflächen in den Chromatogrammen der zweiten Versuchsreihe mit Tribunil bezogen auf die Fläche des jeweiligen Benzol-Peaks beim Einsatz verschiedener Adsorptionsröhrchen, aufgetragen über der Peak-Nummer

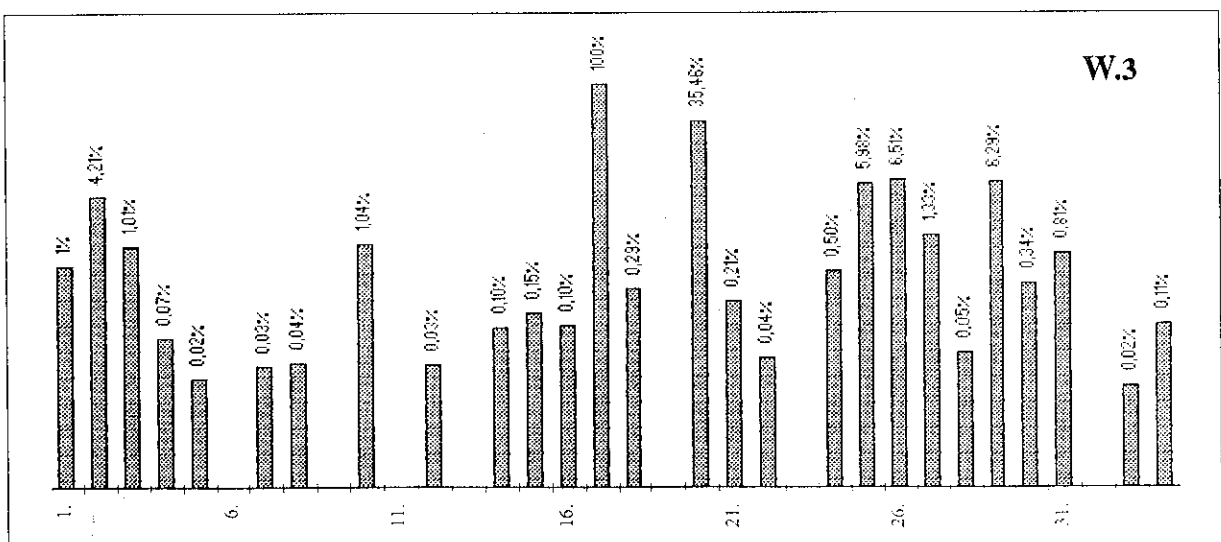
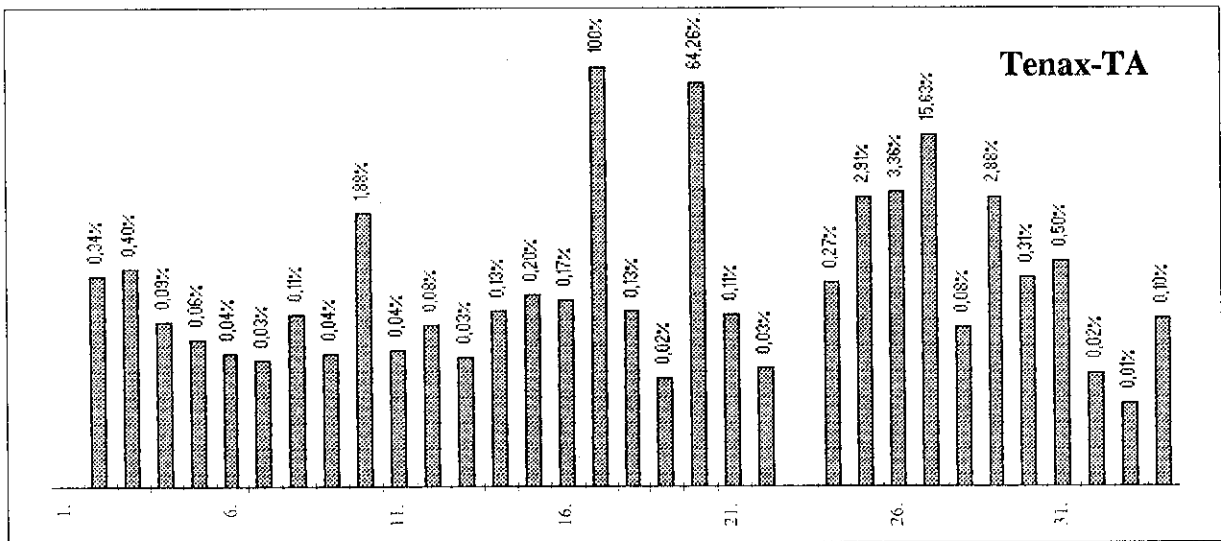
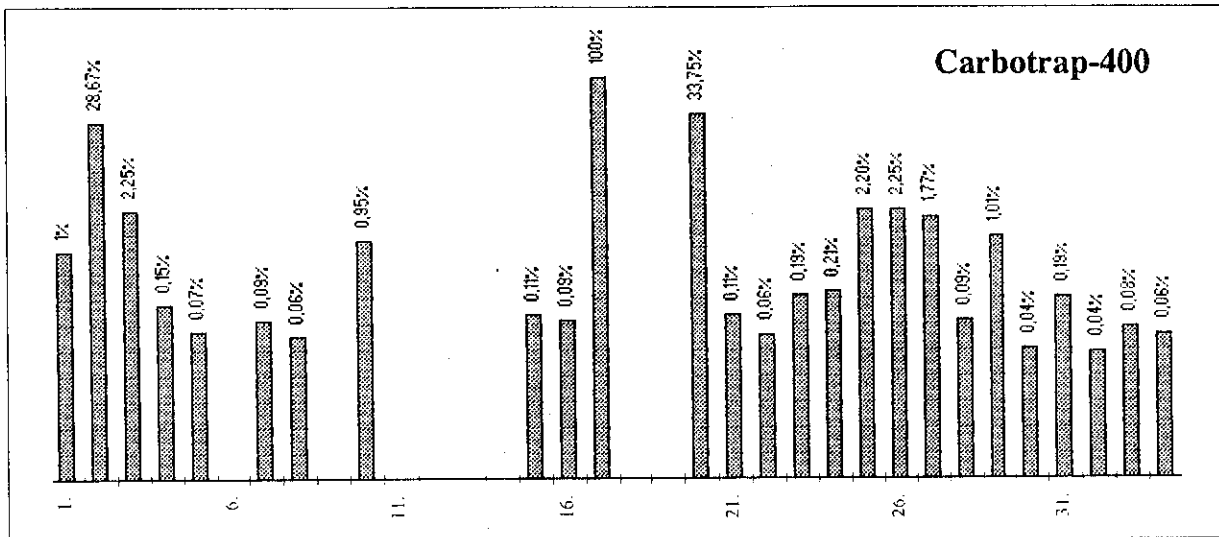
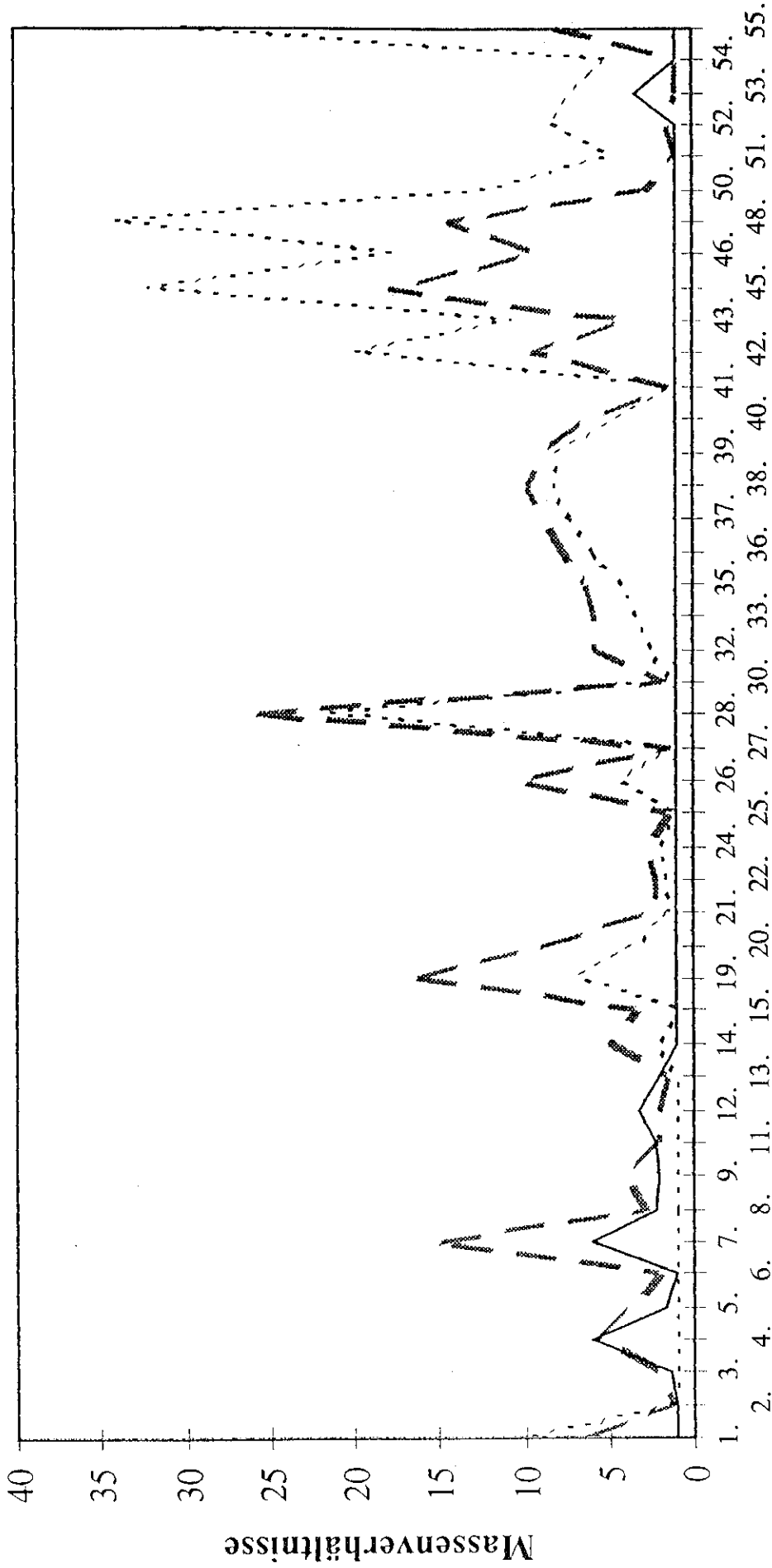
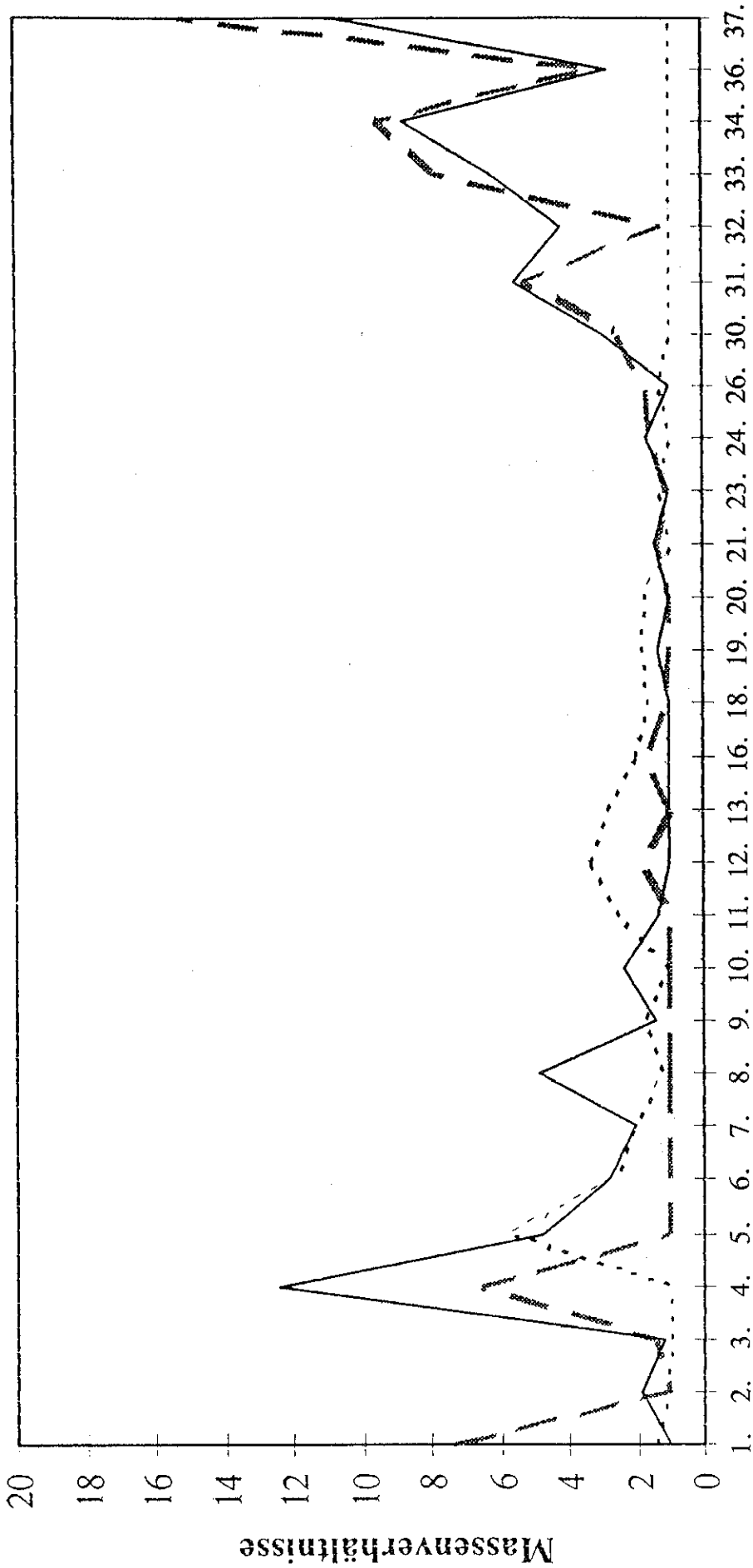


Bild 29: Die Peakflächen in den Chromatogrammen von unbehandeltem Fichtenholz bezogen auf die Fläche des jeweiligen Benzol-Peaks beim Einsatz verschiedener Adsorptionsröhrchen, aufgetragen über der Peak-Nummer



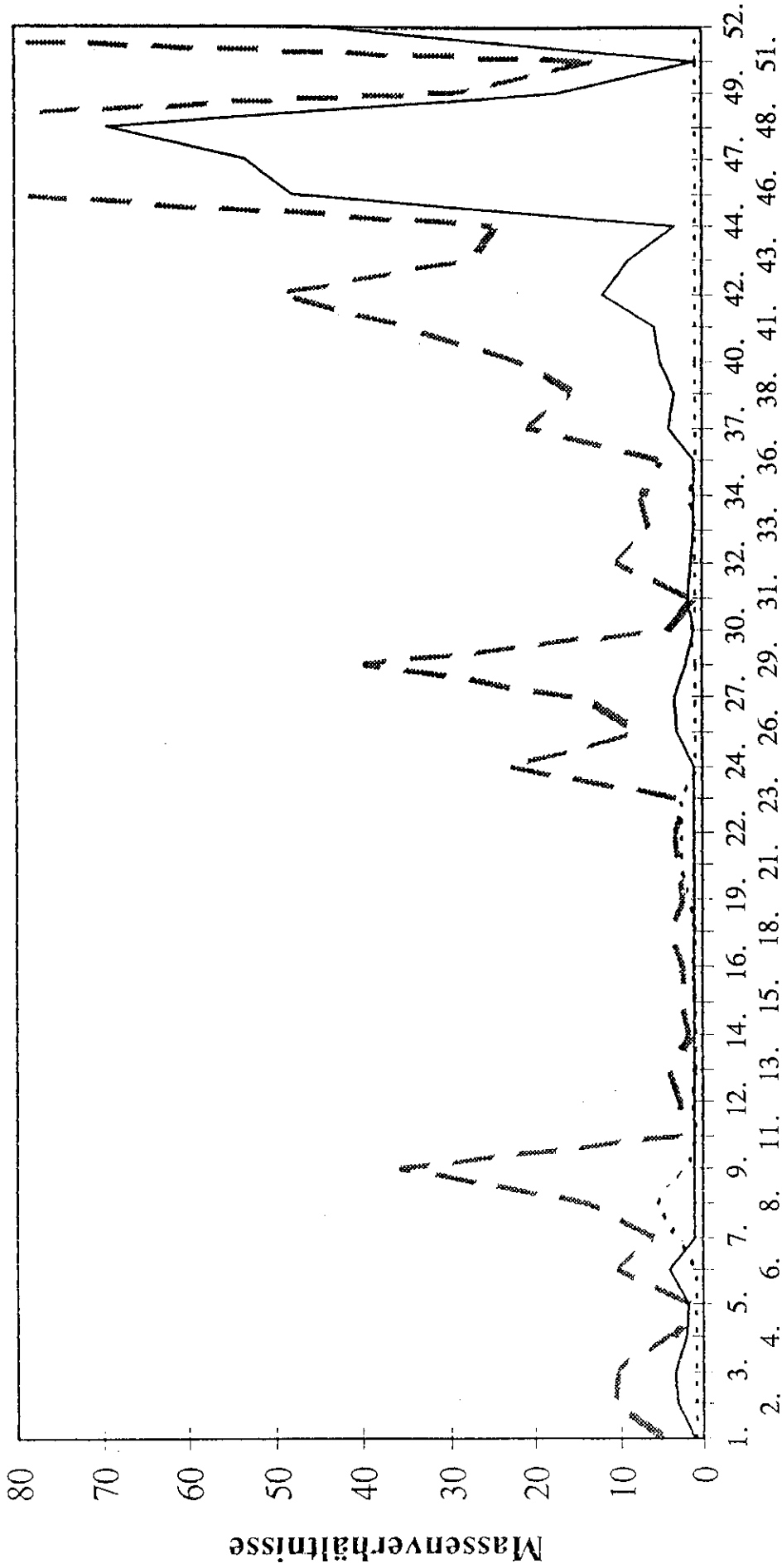
Peak-Nummer nach den Tabellen 24....26

Bild 30: Die Verhältnisse der von Carbotrap-400 (—), von W.1 (.....) und W.3 (— — —) adsorbierten Massen der Brandgaskomponenten in der zweiten Versuchsreihe mit Dithane Ultra WG, aufgetragen über ihrer Peak-Nummer



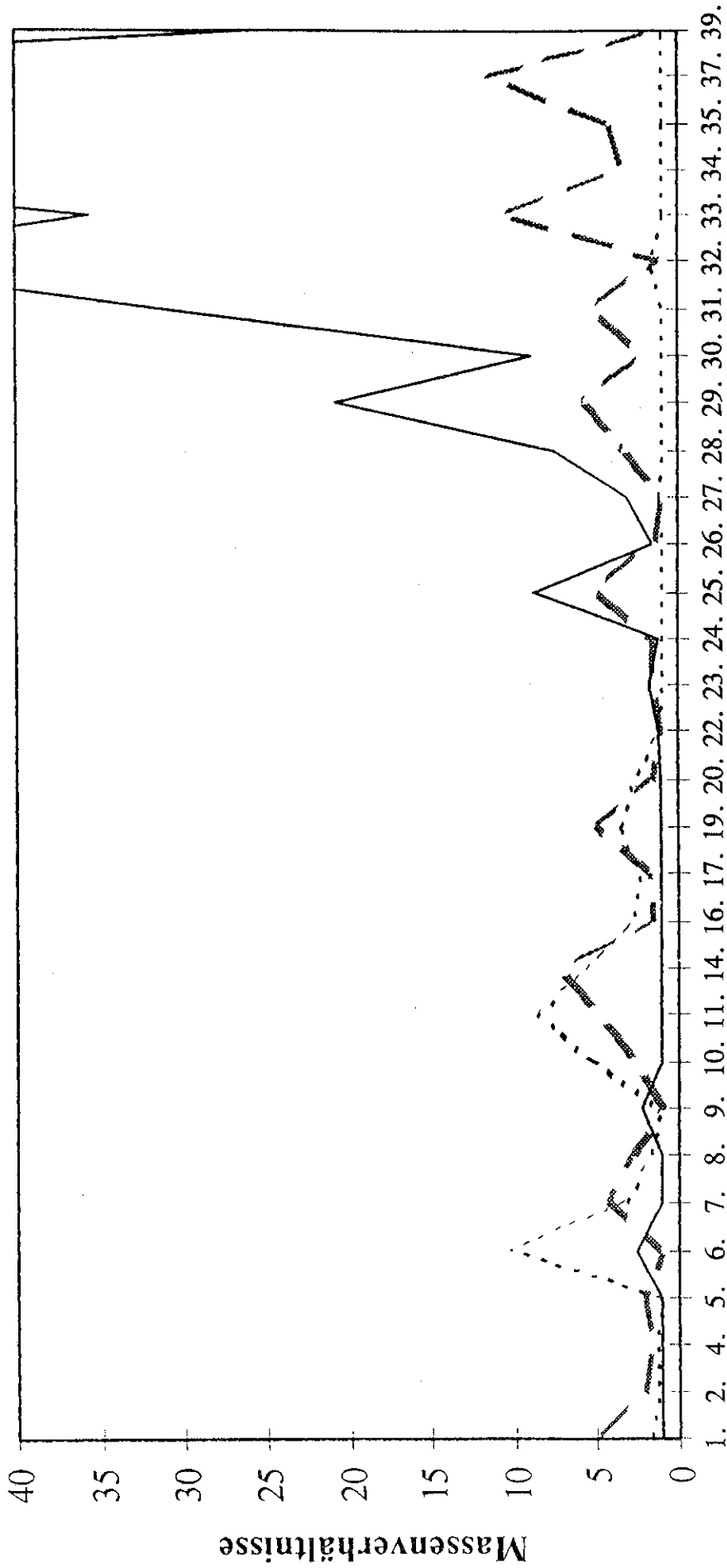
Peak-Nummer nach den Tabellen 27...29

Bild 31: Die Verhältnisse der von Carbotrap-400 (—), von W.2 (.....) und W.3 (- - -) adsorbierten Massen der Brandgaskomponenten in der zweiten Versuchsreihe mit Lentagran WP, aufgetragen über ihrer Peak-Nummer



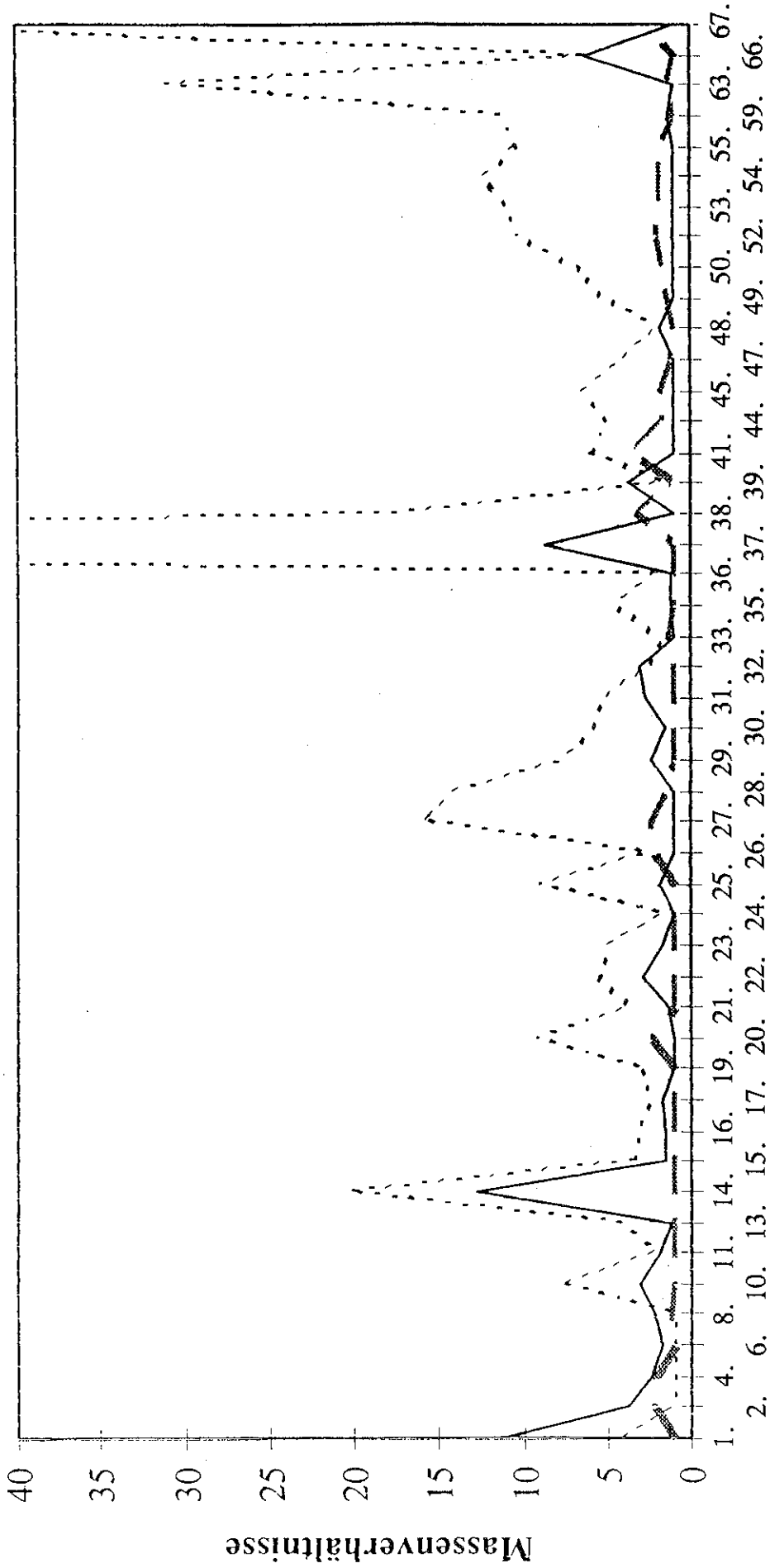
Peak-Nummer nach den Tabellen 30...32

Bild 32: Die Verhältnisse der von Carbotrap-400 (—) und W.3 (---) adsorbierten Massen der Brandgaskomponenten in der zweiten Versuchreihe mit Pyramin WG, aufgetragen über ihrer Peak-Nummer



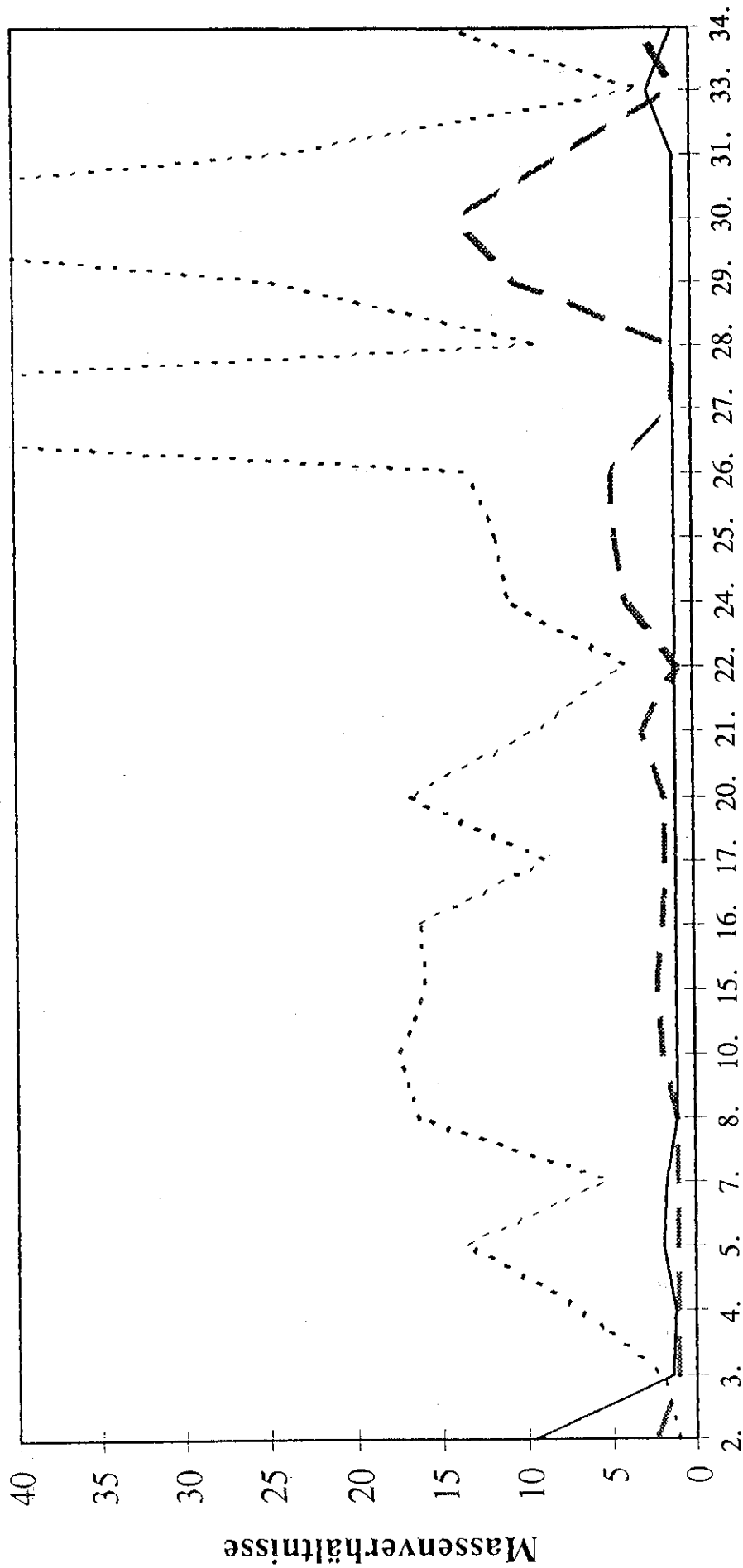
Peak-Nummer nach den Tabellen 33....35

Bild 33: Die Verhältnisse der von Carbotrap-400 (—), von W.2 (.....) und W.3 (---) adsorbierten Massen der Brandgaskomponenten in der zweiten Versuchsreihe mit Rubitox, aufgetragen über ihrer Peak-Nummer



Peak-Nummer nach den Tabellen 36...38

Bild 34: Die Verhältnisse der von Carbotrap-400 (— — — — —), von W.1 (.....) und W.3 (— — —) adsorbierten Massen der Brandgaskomponenten in der zweiten Versuchsreihe mit Tribunil, aufgetragen über ihrer Peak-Nummer



Peak-Nummer nach den Tabellen 39...41

Bild 35: Die Verhältnisse der von Carbotrap-400 (—), von Tenax-TA (.....) und von W.3 (- - - -) adsorbierten Massen der Brandgaskomponenten von unbehandeltem Fichtenholz, aufgetragen über ihrer Peak-Nummer

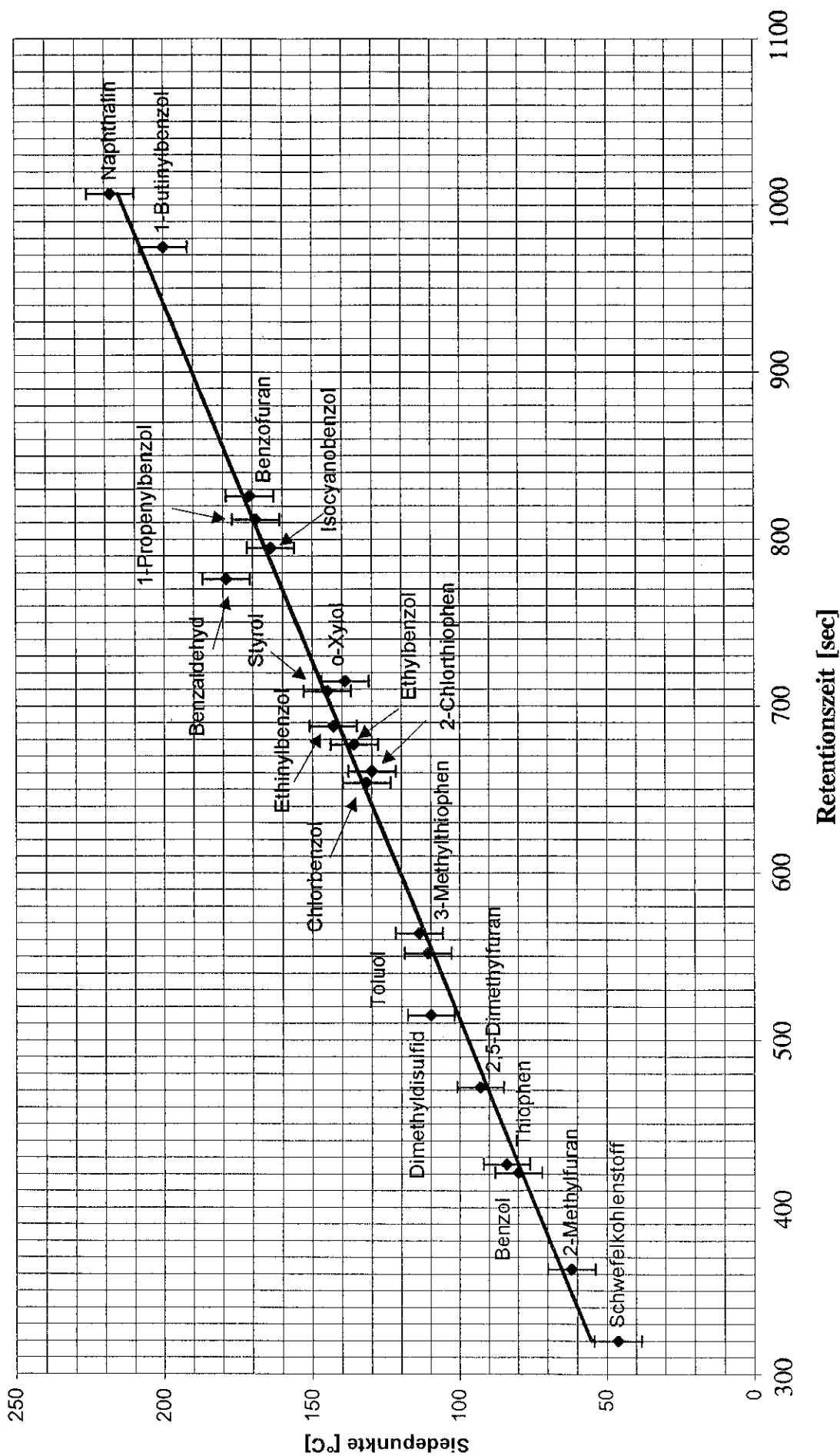


Bild 36: Die Siedepunkte einiger ausgewählter, auf Carbotrap-400 angereicherter PSM-Rauchgaskomponenten, aufgetragen über ihrer Retentionszeit

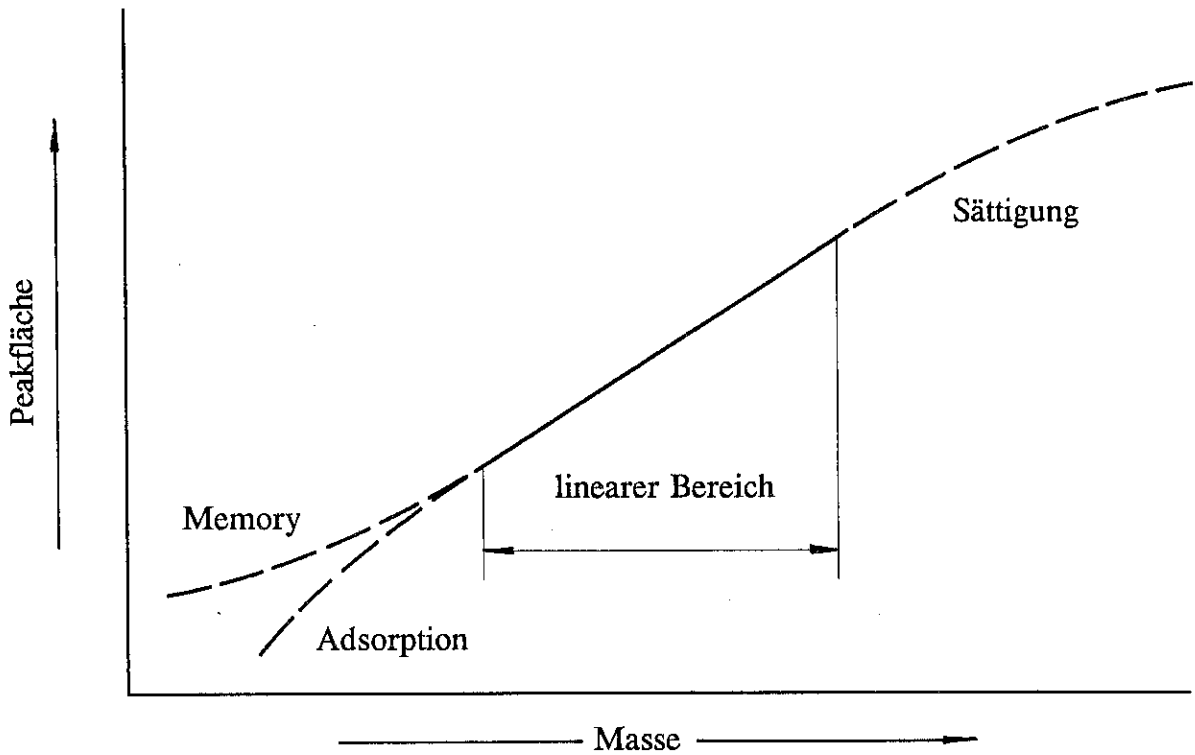


Bild 37: Die Kalibrierfunktion als Abhängigkeit der Größe der Peakfläche von der Menge der untersuchten Probensubstanz

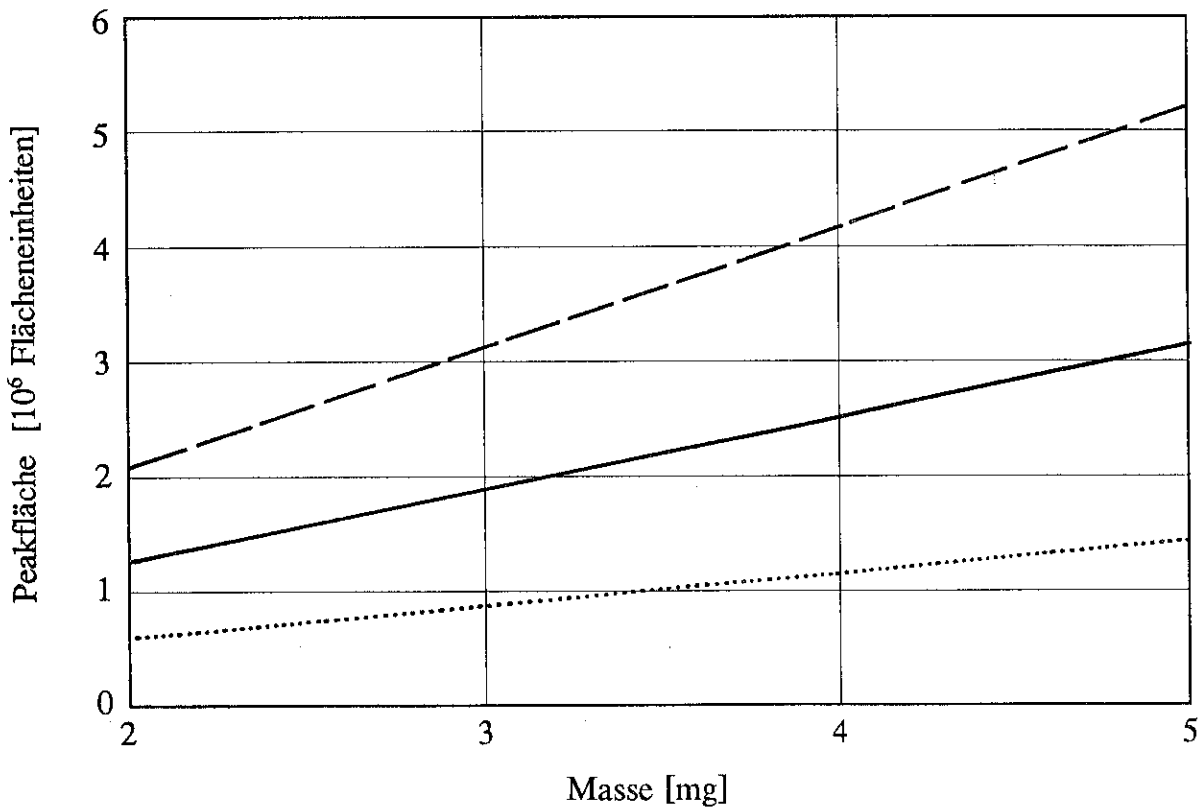


Bild 38: Die Kalibrierfunktionen des BTX-Standards:
Benzol (.....), Toluol (————), o-Xylol (— — —)

Tabelle 1: Die Charakteristika der eingesetzten Pflanzenschutzmittel (PSM)

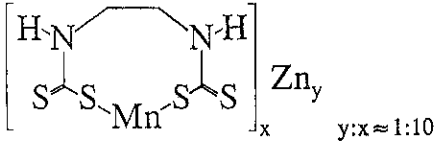
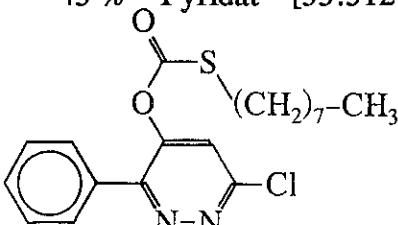
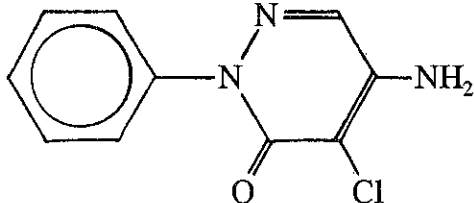
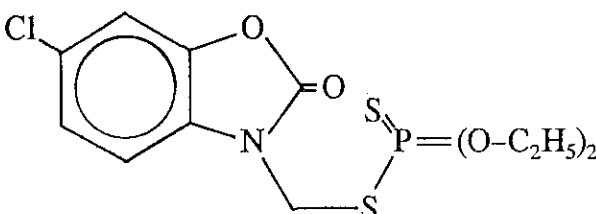
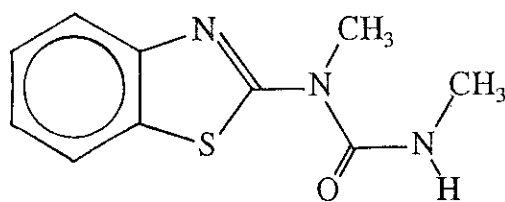
Handelsname Hersteller Konsistenz	Funktion	Gew.-Anteil Wirkstoff [CARN] Strukturformel
Dithane Ultra WG Spiess-Urania ockerfarbenes Granulat, süßlich- unangenehmer Geruch	Fungizid für den Obst-, Wein- und Kartoffelanbau	75 % Mancozeb [8.018-01-7] 
Lentagran WP Shell Agrar weißes Spritzpulver	Herbizid für den Getreide-, Reis- und Maisanbau	45 % Pyridat [55.512-33-9] 
Pyramin WG BASF AG braunes Granulat	Herbizid für den Futter- und Zuckerrüben- anbau	65 % Chlorid-Azon [1.698-60-8] 
Rubitox Rhone-Poulenc rosarotes Spritzpulver, Knoblauchgeruch	Insektizid für den Obst- und Wein- anbau	30 % Phosalon [2.310-17-0] 
Tribunil Bayer AG Spritzpulver, weiß, geruchlos	Herbizid für den Anbau von Getreide, Zwie- beln und Hülsen- früchten	70 % Metha-Benz-Thiazuron [18.691-97-9] 

Tabelle 2: Die Kenndaten der untersuchten Adsorbtionsmaterialien

Adsorbens	spez. Oberfläche [m ² /g]	Partikelgröße		Adsorptionsbereich
		[mesh]	[mm]	
Carbosieve-SIII	820	60/80	0,18...0,25	C ₁ ...C ₄
Carbotrap-B	100	20/40	0,42...0,84	C ₅ ...C ₁₂
Carbotrap-C	10	20/40	0,42...0,84	C ₄ ...C ₁₂
Carbotrap-F	5	20/4	0,42...0,84	C ₉ ...C ₃₀
Carboxen-569	485	20/45	0,35...0,84	C ₂ ...C ₄
Tenax-TA	35	60/80	0,18...0,25	C ₅ ...C ₁₂

Tabelle 3: Die Reaktion der einzelnen PSM auf einen Zündversuch mit einem Streichholz

Substanz	Beobachtung
Dithane Ultra WG	brennt nicht
Lentagran WP	brennt sehr schwach nach längerem Kontakt mit der Zündquelle, verlöscht sehr schnell wieder
Pyramin WG	brennt nicht
Rubitox	brennt nicht, verkohlt teilweise
Tribunil	brennt sehr schwach, verlöscht schnell

Tabelle 4: Die Reaktion der PSM auf Erwärmung mit einem 500 W-Brenner

Substanz	T _{Zersetzung}	Beobachtung
Dithane Ultra WG	85 °C	Flammpunkt etwa bei 90 °C
Lentagran WP	150 °C	starke Ausgasung und Brand, Flammpunkt etwa bei 150 °C
Pyramin WG	180 °C	schmilzt erst, Ausgasung, entflammt aber noch nicht, Flammpunkt etwa bei 230 °C, Brennpunkt etwa bei 270 °C, brennt dann sehr heftig mit starker Rußentwicklung
Rubitox	170 °C	bildet Glut, durch Verkohlung der Oberfläche wird Abbrand verlangsamt, Flammpunkt etwa bei 180 °C
Tribunil	85 °C	Flammpunkt etwa bei 110 °C

Tabelle 5: Die Zersetzungsprodukte der PSM, wenn sie bei 150 °C verschwelt werden

t_R [sec]	Menge Temperatur	[mg] [°C]	Dithane	Lenta-	Pyr-	Rubitox	Tribunil
			Ultra WG	gran WP	amin WG		
			300 152	150 153	300 156	150 153	220 158
256	Dimethyl-Amin			×			
288	4-Methyl-3-Pentansäure			×			
291	2,2,4,4-Tetramethyl-Pentan						×
316	Schwefel-Kohlenstoff		×	×	×	×	
365	2-Methyl-Furan		×		×	×	×
416	Benzol				×		×
444	2,4-Hexadien			×			
458	2,2-Dimethoxy-N-Methyl-Ethan-Amin					×	
459	2-Ethyl-Furan			×			
460	2-Methyl-1-Nitro-Propan				×		
485	1,2-Thiazol		×				
513	Dimethyl-Disulfid				×		
540	O-(3-Methyl-Butyl)-Hydroxyl-Amin				×		
547	2-Propenyliden-Cyclobuten		×	×	×	×	×
552	Toluol				×		
576	3-Hexen-2,5-diol			×			
583	2,2,5,5-Tetramethyl-Hexan				×		
588	Pentyl-Cyclopropan			×			
599	3-Octen			×			
607	1-Ethyl-3-Methyl-Cyclopentan			×			
619	1-Ethyl-2-Methyl-Cyclopentan			×			
699	4-Butoxy-1-Buten				×		
709	Styrol		×		×	×	×
738	1-Methyl-Bicyclo[2.2.1]-2-Hepten			×		×	
774	2,2-Dimethyl-5-Methylen-Bicyclo[2.2.1]-Heptan			×			
776	Benz-Aldehyd						×
781	1-Chlor-4-Methyl-Benzol						×
787	6,6-Dimethyl-3-Methylen-Bicyclo[3.1.1]-Heptan			×			
790	2-Ethyl-Toluol						×

Tabelle 6: Die Zersetzungsprodukte der PSM, wenn sie bei 200 °C verschwelt werden

		Dithane Ultra WG	Lenta- gran WP	Pyr- amin WG	Rubitox	Tribunil
t _R [sec]	Menge Temperatur [mg] [°C]	300 201	150 211	300 200	150 208	220 216
250	Cyclobutanol	×				
255	Dimethyl-Amin				×	×
257	Chlor-Ethin		×	×		
271	1,3-Butadien			×		
276	Mercaptan-Essigsäure				×	
286	Propen					×
288	2,4-Dimethyl-Pentan	×	×			
296	Furan				×	
306	Essigsäure-Methylester	×				
316	Schwefel-Kohlenstoff	×	×	×	×	×
365	2-Methyl-Furan	×	×		×	
416	Benzol	×		×		×
443	Cyclohexen		×			
456	Thio-bis-Ethan				×	
459	2-Ethyl-Furan		×			
483	Thio-Cyansäure-Methylester			×		×
494	Isothio-Cyansäure-Methylester	×		×		
508	Dimethyl-Disulfid			×	×	
512	O-Isobutyl-Hydroxyl-Amin	×	×			
545	1,3,5-Cycloheptatrien				×	
547	2-Propenyliden-Cyclobuten		×			×
574	2,2-Dimethyl-4-Pentalen	×	×			
588	Pentyl-Cyclopropan		×			
599	3-Octen		×			
607	1-Ethyl-3-Methyl-Cyclopentan		×			
619	1-Ethyl-2-Methyl-Cyclopentan		×			
629	1,3-Propan-Dithiol				×	
709	Styrol		×		×	×
737	Diethyl-Disulfid		×		×	×
758	3-Caren		×			
776	Benz-Aldehyd		×			×
789	Dimethyl-Trisulfid		×	×	×	
791	Isocyano-Benzol	×				×
810	1-Propenyl-Benzol			×		

Tabelle 7: Die Arbeitsprotokolle in der Versuchsreihe 1 mit Carbotrap-300-, Carbotrap-400- und Tenax-TA-Adsorptionsröhrchen

	Dithane Ultra WG	Lentagran WP	Pyramin WG	Rubitox	Tribunil
Masse PSM [kg]	0,827	0,291	1,038	0,371	0,485
Masse Holz [kg]	2,01	2,035	2,07	1,997	2,089
Gaspumpe ein [min:sec]	3:30	3:45	3:00	3:30	3:30
Kamintemperatur [°C]	425	425	425	378	463
Gaspumpe aus [min:sec]	5:00	5:15	5:00	5:00	5:10
Kamintemperatur [°C]	475	422	422	384	551
Löschwasser ein [min:sec]	5:10	5:45	6:00	5:30	5:30
Löschwasser aus [min:sec]	5:50	5:55	9:00	5:45	5:40
Lüfter aus [min:sec]	6:00	6:30	7:15	6:10	6:30
Löschwasser ein [min:sec]	./.	7:45	9:30	./.	6:50
Löschwasser aus [min:sec]	./.	8:30	10:00	./.	7:00
Löschwasserbedarf [ℓ]	13	8	47	2	16
Besonderheiten	keine	keine	wegen wiederholter Rückzündung mehrfaches Löschwasser erforderlich	keine	starke Rußbildung

Tabelle 8: Die Identifikationsvorschläge der NIST-Massenspektrenbibliothek für die auf Carbotrap-300-Adsorptionsröhrchen angereicherten Rauchgasbestandteile von Dithane Ultra WG

Ifd. Nr.	t _R [sec]	Substanz	CARN	MS-Werte			Peak-fläche	rel.Fl. [%]	H.-Nr. [20]
				Pur	Fit	Rfit			
1.	212	?					999	0,09	—
2.	251	Dimethyl-Amin	124-40-3	720	812	846	563	0,05	85
3.	258	Luft					963.784	87,50	—
4.	270	?					5.094	0,46	—
:									
7.	286	Isocyano-Methan	593-75-9	854	918	914	2.750	0,25	—
8.									
9.	297	Furan	110-00-9	788	835	895	422	0,04	703
10.	302	2-Propen-Nitril	107-13-1	695	734	926	5.720	0,52	5
:									
13.	319	Schwefel-Kohlenstoff; Kohlenstoff-Disulfid	75-15-0	899	904	987	1.850.124	167,96	181
:									
18.	361	2-Methyl-Furan	534-22-5	524	833	625	1.200	0,11	526
:									
21.	396	1,5-Hexadiin	628-16-0	505	811	579	246	0,02	—
22.	400	2-Hexen-4-in	14.092-20-7	485	652	601	214	0,02	—
23.	418	Benzol	71-43-2	340	670	491	1.101.523	100	39
24.	423	Thiophen	110-02-1	723	962	732	62.951	5,71	901
25.	440	1,5-Hexadien-3-in	821-08-9	547	879	601	628	0,06	—
26.	446	Thio-Cyansäure-Methylester; Methyl-Thio-Cyanat	556-64-9				558	0,05	—
27.	470	2,5-Dimethyl-Furan	625-86-5	471	862	511	961	0,09	—
28.									
29.	490	Isothio-Cyansäure-Methylester; Methyl-Isothio-Cyanat	556-61-6				1.448	0,13	947
:									
32.	513	Dimethyl-Disulfid	624-92-0	790	953	818	1.224	0,11	622
33.									
34.	550	Toluol	108-88-3	906	962	926	352.401	31,99	193
35.	563	2-Methyl-Thiophen	554-14-3	875	971	889	18.995	1,72	—
:									
38.	633	Hexamethyl-Cyclotrisiloxan	541-05-9	736	947	763	763	0,07	—
39.	675	Ethyl-Benzol	100-41-4	634	944	652	1.052	0,10	11
40.									
41.	686	Ethynyl-Benzol	536-74-3	566	962	566	18.687	1,70	—
:									
44.	707	Styrol	100-42-5	918	983	926	24.330	2,21	189
45.	714	o-Xylol	95-47-6	684	930	696	3.205	0,29	208a
46.	717	Thio-Phenol; Phenyl-Mercaptan	108-98-5	458	844	529	1.855	0,17	820

Ifd. Nr.	t _R [sec]	Substanz	CARN	MS-Werte			Peak-fläche	rel.Fl. [%]	H.-Nr. [20]
				Pur	Fit	Rfit			
47.									
48.	775	Benz-Aldehyd	100-52-7				1.938	0,18	302
49.	794	Isocyano-Benzol	931-54-4	741	952	755	4.739	0,43	—
⋮									
54.	824	Benzo-[b]-Furan	271-89-6				2.001	0,18	—
⋮									
58.	876	1-Propinyl-Benzol; 1-Phenyl-1-Propin	673-32-5				1.084	0,10	—
⋮									
70.	1.005	Naphthalin	91-20-3				530	0,05	140
⋮									

Tabelle 9: Die Identifikationsvorschläge der NIST-Massenspektrenbibliothek für die auf Carbotrap-400-Adsorptionsröhrchen angereicherten Rauchgasbestandteile von Dithane Ultra WG

Ifd. Nr.	t _R [sec]	Substanz	CARN	MS-Werte			Peak-fläche	rel.Fl. [%]	H.-Nr. [20]
				Pur	Fit	Rfit			
1.									
2.	253	?					507	0,02	—
3.	259	Luft					2.803.639	125,90	—
4.									
5.	277	Isobuten	115-11-7				4.470	0,20	389
6.	280	?					4.333	0,19	—
7.	286	Propen	115-07-1	621	767	675	41.924	1,88	169
8.	292	Isocyano-Methan	593-75-9	847	919	906	2.631	0,12	—
9.									
10.	304	2-Propen-Nitril	107-13-1	653	727	882	6.375	0,29	5
11.	310	Essigsäure-Methylester	79-20-9	827	907	909	5.837	0,26	378
12.									
13.	320	Schwefel-Kohlenstoff; Kohlenstoff-Disulfid	75-15-0	908	950	952	16·10 ⁶	718,49	181
⋮									
16.	341	Thio-Harnstoff	62-56-6	339	628	350	3.896	0,17	1565
17.									
18.	362	2-Methyl-Furan	534-22-5	514	847	598	1.229	0,06	526
⋮									
23.	420	Benzol	71-43-2	960	979	973	2.226.885	100	39
24.	425	Thiophen	110-02-1	913	983	924	474.288	21,30	901
⋮									
27.	472	2,5-Dimethyl-Furan	625-86-5	521	876	580	1.341	0,06	—

Ifd. Nr.	t _R [sec]	Substanz	CARN	MS-Werte			Peak-fläche	rel.Fl. [%]	H.-Nr. [20]
				Pur	Fit	Rfit			
28.	482	1,2-Thiazol	288-16-4	699	969	711	4.426	0,20	—
29.	491	Isothio-Cyansäure-Methylester; Methyl-Isothio-Cyanat	556-61-6	373	928	387	4.086	0,18	947
30.									
31.	506	Bis(Pyridin-2-yl)-Methanol	35.047-29-1	495	748	571	2.359	0,11	—
32.	514	Dimethyl-Disulfid	624-92-0	751	949	768	4.997	0,22	622
33.									
34.	552	Toluol	108-88-3	897	960	917	835.271	37,51	193
35.	564	2-Methyl-Thiophen	554-14-3				72.973	3,28	—
36.	596	2-Propenyliden-Cyclobuten	52.097-85-5	744	917	756	911	0,04	—
37.	631	<i>m</i> -Cresol; 3-Methyl-Phenol	108-39-4				858	0,04	118a
38.	635	Hexamethyl-Cyclotrisiloxan	541-05-9	540	934	564	1.339	0,06	—
39.	676	Ethyl-Benzol	100-41-4	830	978	839	6.592	0,30	11
40.	680	<i>p</i> -Phenol-Sulfonsäure	98-67-9	545	973	545	1.650	0,07	878
41.	687	Ethynyl-Benzol	536-74-3	617	929	617	215.574	9,68	—
42.	693	Nitro-Methyl-Benzol	622-42-4	558	955	565	7.220	0,32	—
43.	702	?					4.881	0,22	—
44.	709	Styrol	100-42-5	936	958	945	353.439	15,87	189
45.	715	<i>o</i> -Xylol	95-47-6	797	939	810	34.825	1,56	208a
46.	718	Thio-Phenol; Phenyl-Mercaptan	108-98-5	554	966	554	20.331	0,91	820
47.	725	2,4-Dimethyl-Thiophen	638-00-6	359	785	401	2.563	0,12	—
48.	777	Benz-Aldehyd	100-52-7				13.552	0,61	302
49.	795	Isocyano-Benzol	931-54-4				81.697	3,67	—
50.	803	Cyano-Benzol; Benzo-Nitril	100-47-0				6.221	0,28	417
51.	809	4-Ethynyl-Toluol	766-97-2	571	909	572	5.175	0,23	—
52.	811	1-Propenyl-Benzol; β -Methyl-Styrol	637-50-3				6.653	0,30	—
53.									
54.	826	Benzo-[<i>b</i>]-Furan	271-89-6	773	911	773	56.064	2,52	—
55.	837	1,1,3,3,5,5-Hexamethyl-Trisiloxan	1.189-93-1				858	0,04	—
56.	858	1-(3,4-Dimethyl-Phenyl)-2-Amino-Propan	102-31-8	567	909	595	2.700	0,12	—
57.	869	6-Noninsäure	56.630-31-0	357	780	403	575	0,03	—
58.	877	1-Propinyl-Benzol; 1-Phenyl-1-Propin	673-32-5	895	980	904	49.129	2,21	—
59.	885	2,4,6-Cycloheptatrien-1-Carbonitril	13.612-59-4	501	948	501	4.450	0,20	—
60.	891	α -(Methyl-Oxy)-Phenyl-(Methyl-Acetat)	56.143-21-6	453	794	453	1.858	0,08	—
61.	913	?					714	0,03	—
62.	916	?					720	0,03	—
63.	925	7-Methyl-Benzo-[<i>b</i>]-Furan	17.059-52-8	676	937	706	3.227	0,14	—
64.	931	3-Phenyl-Acrolein	104-55-2	830	976	843	5.403	0,24	—
65.	934	2-Methyl-Benzo-[<i>b</i>]-Furan	4.265-25-2	789	988	799	3.637	0,16	—
66.	950	?					1.233	0,06	—
67.	964	?					519	0,02	—
68.	975	1-Methyl-2-Cyclopropen-1-yl-Benzol	65.051-83-4	613	939	626	1.857	0,08	—
69.	981	(1-Methylen-2-Propenyl)-Benzol	2.288-18-8	687	877	694	2.837	0,13	—
70.	1.007	Naphthalin	91-20-3	905	985	905	70.455	3,16	140

Ild. Nr.	t _R [sec]	Substanz	CARN	MS-Werte			Peak-fläche	rel.Fl. [%]	H.-Nr. [20]
				Pur	Fit	Rfit			
71.	1.012	Benzo-Thiophen	95-15-8	641	948	653	13.467	0,60	—
72.	1.100	1,4-Dihydro-1,4-Methano-Nahphtalin	4.453-90-1	563	868	620	721	0,03	—
73.	1.113	?					654	0,03	—
74.	1.115	1-Methyl-Nahphtalin	90-12-0	386	859	437	630	0,03	—
75.	1.234	Acenaphten; 1,2-Dihydro-Acenaphthylen	83-32-9	404	785	472	569	0,03	1289

Tabelle 10: Die Identifikationsvorschläge der NIST-Massenspektrenbibliothek für die auf Tenax-TA-Adsorptionsröhrchen angereicherten Rauchgasbestandteile von Dithane Ultra WG

Ild. Nr.	t _R [sec]	Substanz	CARN	MS-Werte			Peak-fläche	rel.Fl. [%]	H.-Nr. [20]
				Pur	Fit	Rfit			
1.									
2.	251	Aziridin	151-56-4	507	726	639	571	0,02	16
3.	259	Luft					26.871	0,87	—
4.	272	?					614	0,02	—
5.									
10.	302	2-Propen-Nitril	107-13-1	699	722	953	19.294	0,63	5
11.									
12.	313	?					1.283	0,04	—
13.	319	Schwefel-Kohlenstoff; Kohlenstoff-Disulfid	75-15-0	896	901	987	1.319.006	42,89	181
14.	327	?					8.009	0,26	—
15.	337	?					705	0,02	—
16.									
17.	347	2-Buten-Nitril	4.786-20-3	550	896	588	3.852	0,13	—
18.	361	2-Hexen-4-in	14.092-20-7	435	870	458	611	0,02	—
19.	371	3-Methyl-Furan	930-27-8				1.694	0,06	—
20.	387	Isobuten-Nitril	126-98-7	800	918	800	2.410	0,08	1423
21.	396	1,5-Hexadiin	628-16-0	758	967	722	4.590	0,15	—
22.	400	2,4-Hexadiin	2.809-69-0	644	916	684	627	0,02	—
23.	419	Benzol	71-43-2	958	977	971	3.075.440	100	39
24.	424	Thiophen	110-02-1	912	983	922	661.875	21,52	901
25.									
26.	446	Thio-Cyansäure-Methylester; Methyl-Thio-Cyanat	556-64-9	398	711	446	2.688	0,09	—
27.									
28.	481	1,2-Thiazol	288-16-4	618	955	638	713	0,02	—
29.	490	Isothio-Cyansäure-Methylester; Methyl-Isothio-Cyanat	556-61-6				7.230	0,24	947

Ifd. Nr.	t _R [sec]	Substanz	CARN	MS-Werte			Peak-fläche	rel.Fl. [%]	H.-Nr. [20]
				Pur	Fit	Rfit			
30.	495	4-Methyl-Pyridin	108-89-4				2.751	0,09	772
31.	503	2,4-Pentadien-Nitril	1.615-70-9	616	871	669	5.936	0,19	—
32.	514	Dimethyl-Disulfid	624-92-0	824	959	849	9.470	0,31	622
33.	537	1,2-bis-Methylen-Cyclobutan	14.296-80-1	434	728	546	1.111	0,04	—
34.	551	Toluol	108-88-3	903	962	922	1.125.825	36,61	193
35.	564	2-Methyl-Thiophen	554-14-3				67.891	2,21	—
36.	595	2-Propenyliden-Cyclobuten	52.097-85-5	658	946	668	698	0,02	—
:									
39.	675	Ethyl-Benzol	100-41-4	671	975	677	2.298	0,07	11
40.									
41.	684	Ethynyl-Benzol	536-74-3	649	977	649	102.624	3,34	—
:									
44.	708	Styrol	100-42-5	925	983	934	110.309	3,59	189
45.	714	<i>o</i> -Xylol	95-47-6	767	928	779	11.236	0,37	208a
46.	717	Thio-Phenol; Phenyl-Mercaptan	108-98-5	455	928	779	6.099	0,20	820
47.									
48.	776	Benz-Aldehyd	100-52-7				4.546	0,15	302
49.	794	Isocyano-Benzol	931-54-4				13.349	0,43	—
:									
53.	821	1-Chlor-Ethenyl-Sulfonyl-Benzol	5.535-51-3	422	737	534	1.775	0,06	—
54.	825	Benzo-[<i>b</i>]-Furan	271-89-6	486	871	511	11.160	0,36	—
:									
58.	876	1-Propinyl-Benzol; 1-Phenyl-1-Propin	673-32-5	859	979	868	6.035	0,20	—
:									
70.	1.006	Naphthalin	91-20-3	828	981	828	6.507	0,21	140
71.	1.011	Benzo-Thiophen	95-15-8				749	0,02	—
:									
75.	1.233	Acenaphten; 1,2-Dihydro-Acenaphthylen	83-32-9	291	814	337	735	0,02	1289

Tabelle 11: Die Identifikationsvorschläge der NIST-Massenspektrenbibliothek für die auf Carbotrap-300-Adsorptionsröhrchen angereicherten Rauchgasbestandteile von Lentagran WP

Ifd. Nr.	t _R [sec]	Substanz	CARN	MS-Werte			Peak-fläche	rel.Fl. [%]	H.-Nr. [20]
				Pur	Fit	Rfit			
1.	210	?					467	0,05	—
2.	215	?					420	0,05	—
3.	254	Dimethyl-Amin	124-40-3	722	822	848	1.860	0,21	85
4.	260	Luft					302.903	34,05	—
5.	265	?					45.778	5,15	—

Tabelle 12: Die Identifikationsvorschläge der NIST-Massenspektrenbibliothek für die auf Carbotrap-400-Adsorptionsröhrchen angereicherten Rauchgasbestandteile von Lentagran WP

Ifd. Nr.	t _R [sec]	Substanz	CARN	MS-Werte			Peak-fläche	rel.Fl. [%]	H.-Nr. [20]
				Pur	Fit	Rfit			
3.	255	Methyl-Silan	992-94-9	727	772	868	1.539	0,07	—
4.	260	Luft					483.941	22,52	—
5.	265	?					37.165	1,73	—
6.	272	2,5-Dihydro-Thiophen-1,1-Dioxid	77-79-2	452	608	528	40.830	1,90	—
7.	293	<i>trans</i> -1,3-Pentadien	504-60-9	770	802	852	2.973	0,14	—
8.	299	Furan	110-00-9	704	886	783	6.367	0,30	703
9.	306	<i>cis</i> -1,3-Pentadien	1.574-41-0	717	857	749	3.336	0,16	—
10.	321	Schwefel-Kohlenstoff; Kohlenstoff-Disulfid	75-15-0	860	881	962	130.223	6,06	181
11.	333	3-Methyl-1,4-Pentadien	1.115-08-8	385	792	413	518	0,02	—
12.	344	?					2.100	0,10	—
13.	358	Tetrahydro-3,6-Dimethyl-Pyran-2-on	3.720-22-7	593	785	684	767	0,04	—
14.	363	2-Methyl-Furan	534-22-5	743	849	867	3.880	0,18	526
15.	367	(1-Methyl-Butyl)-Acetat	626-38-0	624	817	722	1.158	0,05	—
16.									
17.	398	1,5-Hexadien-3-in	821-08-9	817	956	828	4.797	0,22	—
18.	402	1,4-Cyclohexadien	628-41-1	759	942	788	4.517	0,21	—
19.	406	3-Hexen-1-in	17.669-38-4	744	926	758	3.416	0,16	—
20.	421	Benzol	71-43-2	958	969	958	2.148.865	100	39
21.	426	Thiophen	110-02-1	753	964	762	96.495	4,49	901
22.	462	<i>trans</i> -1,3-Dimethyl-Cyclopentan	1.759-58-6	631	845	719	1.648	0,08	—
23.	472	2,5-Dimethyl-Furan	625-86-5	700	851	766	2.342	0,11	—
24.									
25.	553	Toluol	108-88-3	933	987	956	933.331	43,43	193
26.	566	2-Methyl-Thiophen	554-14-3	781	888	805	13.695	0,64	—
27.	582	Hexanal	66-25-1	442	756	531	721	0,03	557
28.	594	4-Methyl-Cycloheptanon	13.609-59-1	665	865	723	7.040	0,33	—
29.	597	1-Chlor-Heptan	629-06-1	482	786	554	1.197	0,06	—
30.	609	2,3,5-Trimethyl-Hexan	1.069-53-0	521	881	560	1.605	0,07	—
31.	636	Hexamethyl-Cyclotrisiloxan	541-05-9	613	936	627	1.532	0,07	—
32.	654	Chlor-Benzol	108-90-7	905	989	905	9.080	0,42	133
33.	677	Ethyl-Benzol	100-41-4	919	978	929	20.669	0,96	11
34.	688	Ethinyl-Benzol	536-74-3	622	973	622	150.346	7,00	—
35.	710	Styrol	100-42-5	935	984	944	371.518	17,29	189
36.	716	<i>o</i> -Xylol	95-47-6	825	927	839	33.465	1,56	208a
37.	777	Benz-Aldehyd	100-52-7	880	988	880	26.257	1,22	302
38.	796	Isocyano-Benzol	931-54-4	862	941	911	735.001	34,20	—
39.	813	1-Propenyl-Benzol; β -Methyl-Styrol	637-50-3	714	924	714	9.778	0,46	—
40.	827	Benzo-[<i>b</i>]-Furan	271-89-6	774	916	774	51.823	2,41	—

Ild. Nr.	t _R [sec]	Substanz	CARN	MS-Werte			Peak-fläche	rel.Fl. [%]	H.-Nr. [20]
				Pur	Fit	Rfit			
41.									
42.	859	?					3.289	0,15	—
43.	878	1-Propinyl-Benzol; 1-Phenyl-1-Propin	673-32-5	890	981	900	78.340	3,65	—
44.	886	Propadienyl-Benzol	2.327-99-3	635	821	640	3.925	0,18	—
45.	926	3-Phenyl-Acrolein	104-55-2	730	971	741	1.287	0,06	—
46.	937	7-Methyl-Benzo-[b]-Furan	17.059-52-8	627	944	638	3.536	0,16	—
47.	976	1-Methyl-(1 <i>H</i> -Inden)	767-59-9	679	964	679	2.941	0,14	—
48.	982	(1-Methylen-2-Propenyl)-Benzol	2.288-18-8	648	925	648	5.016	0,23	—
49.	991	Chinolin; Benzo-[b]-Pyridin	91-22-5	655	893	676	1.607	0,07	888
50.	1.009	Naphthalin	91-20-3	789	966	795	128.621	5,99	140
51.	1.102	1,4-Dihydro-1,4-Methano-Naphthalin	4.453-90-1	779	966	779	6.337	0,29	—
52.	1.118	1-Ethyliden-(1 <i>H</i> -Inden)	2.471-83-2	715	969	723	5.455	0,25	—
53.	1.164	2-Vinyl-Naphthalin	827-54-3	840	987	840	7.970	0,37	—
54.	1.212	Acenaphten; 1,2-Dihydro-Acenaphthylen	83-32-9	653	975	662	1.798	0,08	1289
55.	1.236	Biphenylen	259-79-0	879	986	879	19.000	0,88	—

Tabelle 13: Die Identifikationsvorschläge der NIST-Massenspektrenbibliothek für die auf Tenax-TA-Adsorptionsröhrchen angereicherten Rauchgasbestandteile von Lentagran WP

Ild. Nr.	t _R [sec]	Substanz	CARN	MS-Werte			Peak-fläche	rel.Fl. [%]	H.-Nr. [20]
				Pur	Fit	Rfit			
:									
3.	254	Aziridin	151-56-4	531	732	662	637	0,03	16
:									
6.	274	?					2.317	0,12	—
7.	294	Isobutan	75-28-5	665	763	725	1.134	0,06	45
8.	300	Furan	110-00-9				840	0,04	703
9.	307	2-Propen-Nitril	107-12-1	587	738	777	6.099	0,32	—
10.	322	Schwefel-Kohlenstoff; Kohlenstoff-Disulfid	75-15-0	551	707	632	21.441	1,13	181
11.	334	<i>trans</i> -1,3-Pentadien	504-60-9	554	772	572	488	0,03	—
12.	346	Amino-Ameisensäure-Phenylester	622-46-8	589	767	688	4.371	0,23	—
13.									
14.	364	2-Methyl-Furan	534-22-5	738	873	839	8.133	0,43	526
15.									
16.	373	3-Methyl-Furan	930-27-8	444	833	513	1.798	0,09	—
17.	399	1,5-Hexadien-3-in	821-08-9	944	971	944	12.041	0,63	—
18.	403	1,3-Cyclohexadien	592-57-4	841	928	870	4.698	0,25	—
19.	407	1,4-Cyclohexadien	628-41-1	757	953	783	1.663	0,09	—

Ild. Nr.	t _R [sec]	Substanz	CARN	MS-Werte			Peak-fläche	rel.Fl. [%]	H.-Nr. [20]
				Pur	Fit	Rfit			
20.	422	Benzol	71-43-2	957	976	970	1.898.415	100	39
21.	427	Thiophen	110-02-1	792	973	802	153.211	8,07	901
22.	464	Isobutensäure-2-Propenylester	96-05-9	374	641	468	510	0,03	—
23.	474	2,5-Dimethyl-Furan	625-86-5	704	886	777	1.323	0,07	—
24.	519	Spiro[3.3]-Hepta-1,5-dien	22.635-78-5	392	785	441	403	0,02	—
25.	554	Toluol	108-88-3	919	973	928	564.256	29,72	193
26.	567	2-Methyl-Thiophen	554-14-3	727	953	751	9.401	0,50	—
27.									
28.	595	2-Methyl-2-Oxiranyl-Cyclobutanon	75.314-19-1	534	855	569	1.414	0,07	—
29.	598	1-Chlor-1-Methyl-Cyclopropan	50.915-28-1	451	763	571	985	0,05	—
30.									
31.									
32.	656	Chlor-Benzol	108-90-7	627	965	640	2.107	0,11	133
33.	679	Ethyl-Benzol	100-41-4	873	978	882	3.899	0,21	11
34.	690	Ethinyl-Benzol	536-74-3	739	985	739	32.635	1,72	—
35.	711	Styrol	100-42-5	927	984	936	50.261	2,65	189
36.	717	<i>o</i> -Xylol	95-47-6				5.340	0,28	208a
37.									
38.	798	Isocyano-Benzol	931-54-4				28.125	1,48	—
39.									
40.	829	Benzo-[<i>b</i>]-Furan	271-89-6	474	865	493	3.553	0,19	—
41.									
42.									
43.	880	1-Propinyl-Benzol; 1-Phenyl-1-Propin	673-32-5				3.448	0,18	—
44.									
45.									
46.									
47.									
48.									
49.									
50.	1.010	Naphthalin	91-20-3	668	979	668	1.535	0,08	140
51.									

Tabelle 14: Die Identifikationsvorschläge der NIST-Massenspektrenbibliothek für die auf Carbotrap-300-Adsorptionsröhrchen angereicherten Rauchgasbestandteile von Pyramin WG

Ild. Nr.	t _R [sec]	Substanz	CARN	MS-Werte			Peak-fläche	rel.Fl. [%]	H.-Nr. [20]
				Pur	Fit	Rfit			
1.									
2.	260	Luft					332.828	15,06	—
3.	265	?					594.754	26,91	—
4.	270	2,5-Dihydro-Thiophen-1,1-Dioxid	77-79-2	499	719	647	23.056	1,04	—
5.	272	1,3-Butadien	106-99-0	570	759	698	68.838	3,11	44
6.	276	Isobuten	115-11-7				11.701	0,53	389
7.									
8.	287	Propen	115-07-1				61.817	2,80	169

lfd. Nr.	t _R [sec]	Substanz	CARN	MS-Werte			Peak-fläche	rel.Fl. [%]	H.-Nr. [20]
				Pur	Fit	Rfit			
9.	294	4-Methyl-3-Pentensäure	504-85-8	574	698	706	671	0,03	—
10.	297	3-Methyl-2,5-Furandion	616-02-4	533	741	680	4.999	0,23	—
11.	300	Furan	110-00-9				23.207	1,05	703
12.	302	2-Propen-Nitril	107-13-1	649	695	879	320.167	14,48	5
13.	311	?					15.402	0,70	—
14.	322	Schwefel-Kohlenstoff; Kohlenstoff-Disulfid	75-15-0	832	875	926	63.396	2,87	181
15.	329	2-Butin	503-17-3	703	775	768	11.915	0,54	697
16.									
17.	345	1-Penten-3-in	646-05-9	614	851	641	1.235	0,06	—
18.	349	4-Methyl-1-Pentin	7.154-75-8				820	0,04	—
19.	364	2-Methyl-Furan	534-22-5	754	853	858	16.383	0,74	526
20.									
21.	390	2-Buten-Nitril	4.786-20-3	848	907	920	1.581	0,07	—
22.									
25.	407	1,4-Cyclohexadien	628-41-1	805	878	873	484	0,02	—
26.	422	Benzol	71-43-2	955	976	968	2.210.442	100	39
27.	427	Thiophen	110-02-1	562	926	569	48.245	2,18	901
28.									
29.	446	Thio-Cyansäure-Methylester; Methyl-Thio-Cyanat	556-64-9	787	926	833	5.705	0,26	—
30.	460	?					868	0,04	—
31.									
32.	473	2,5-Dimethyl-Furan	625-86-5	688	904	745	2.721	0,12	—
33.	485	3-Methyl-2-Cyclopenten-1-on	2.758-18-1	460	782	523	1.022	0,05	—
34.	494	p-Phenol-Sulfonsäure	98-67-9	378	781	423	1.396	0,06	878
35.	503	2-Chlor-2-Propen-Nitril	920-37-6	864	923	914	1.565	0,07	—
36.									
37.	511	?					3.859	0,17	—
38.	516	Dimethyl-Disulfid	624-92-0	534	839	569	1.329	0,06	622
39.									
40.	547	?					1.238	0,06	—
41.	554	Toluol	108-88-3	911	961	931	407.386	18,43	193
42.	566	2-Methyl-Thiophen	554-14-3	543	939	562	2.828	0,13	—
43.									
44.	595	?					599	0,03	—
45.									
46.	637	Hexamethyl-Cyclotrisiloxan	541-05-9	848	947	864	2.427	0,11	—
47.	655	Chlor-Benzol	108-90-7	910	987	910	6.914	0,31	133
48.									
49.	678	Ethyl-Benzol	100-41-4	905	977	915	7.703	0,35	11
50.	689	Ethynyl-Benzol	536-74-3	531	957	531	20.006	0,91	—
51.	711	Styrol	100-42-5	939	985	946	39.458	1,79	189
52.	717	o-Xylol	95-47-6	769	902	782	4.920	0,22	208a

lfd. Nr.	t _R [sec]	Substanz	CARN	MS-Werte			Peak-fläche	rel.Fl. [%]	H.-Nr. [20]
				Pur	Fit	Rfit			
53.									
54.	778	Benz-Aldehyd	100-52-7	758	955	776	2.050	0,09	302
:									
57.	797	Isocyano-Benzol	931-54-4				43.166	1,95	—
58.	814	1-Propenyl-Benzol; β-Methyl-Styrol	637-50-3				2.019	0,09	—
59.	828	Benzo-[b]-Furan	271-89-6	550	824	590	2.215	0,10	—
60.	836	1,1,3,3,5,5-Hexamethyl-Trisiloxan	1.189-93-1				602	0,03	—
61.									
62.	879	1-Propinyl-Benzol; 1-Phenyl-1-Propin	673-32-5				757	0,03	—
63.	886	2,4,6-Cycloheptatrien-1-Carbonitril	13.612-59-4	463	895	480	528	0,02	—
:									
69.	1.008	Naphthalin	91-20-3	555	916	579	594	0,03	140
70.	1.010	?					629	0,03	—
71.									
72.	1.036	Benzo-1,2-Thiazol-3-Carbonsäure	40.991-34-2	669	953	685	1.050	0,05	—

Tabelle 15: Die Identifikationsvorschläge der NIST-Massenspektrenbibliothek für die auf Carbotrap-400-Adsorptionsröhrchen angereicherten Rauchgasbestandteile von Pyramin WG

lfd. Nr.	t _R [sec]	Substanz	CARN	MS-Werte			Peak-fläche	rel.Fl. [%]	H.-Nr. [20]
				Pur	Fit	Rfit			
1.	254	Methyl-Silan	992-94-9	788	801	945	542	0,04	—
2.	260	Luft					145.435	9,79	—
3.	265	?					184.552	12,42	—
4.	270	2,5-Dihydro-Thiophen-1,1-Dioxid	77-79-2	432	698	562	15.640	1,05	—
5.									
6.	279	Isobuten	115-11-7	637	784	711	5.035	0,34	389
7.	284	?					1.462	0,10	—
8.	287	Propen	115-07-1	761	813	825	104.064	7,00	169
9.	293	?					2.407	0,16	—
10.	297	?					3.308	0,22	—
11.	300	Furan	110-00-9				12.949	0,87	703
12.	303	2-Propen-Nitril	107-13-1	706	738	942	128.100	8,62	5
13.	311	?					9.634	0,65	—
14.	322	Schwefel-Kohlenstoff; Kohlenstoff-Disulfid	75-15-0	578	720	666	50.280	3,38	181
15.	329	2-Butin	503-17-3	668	735	757	9.279	0,62	697
16.	334	trans-1,3-Pentadien	504-60-9				2.455	0,17	—

Ifd. Nr.	t _R [sec]	Substanz	CARN	MS-Werte			Peak-fläche	rel.Fl. [%]	H.-Nr. [20]
				Pur	Fit	Rfit			
17.	345	1-Penten-3-in	646-05-9	540	776	563	2.680	0,18	—
18.	350	4-Methyl-1-Pentin	7.154-75-8				2.527	0,17	—
19.	364	2-Methyl-Furan	534-22-5	696	858	793	6.335	0,43	526
20.	373	3-Methyl-Furan	930-27-8	453	799	533	532	0,04	—
21.	390	2-Buten-Nitril	4.786-20-3	864	914	934	2.316	0,16	—
:									
24.	403	1,3-Cyclohexadien	592-57-4	735	940	771	947	0,06	—
25.	407	5-Methyl-1,3-Cyclopentadien	26.519-91-5	697	882	764	945	0,06	—
26.	422	Benzol	71-43-2	960	978	973	1.485.994	100	39
27.	427	Thiophen	110-02-1	518	905	525	30.128	2,03	901
28.	435	1,5-Hexadiin	628-16-0	703	879	766	3.532	0,24	—
29.	447	Thio-Cyansäure-Methylester; Methyl-Thio-Cyanat	556-64-9	811	931	850	6.979	0,47	—
:									
32.	474	2,5-Dimethyl-Furan	625-86-5	735	905	797	3.225	0,22	—
33.	486	?					420	0,03	—
34.	494	4-Methyl-Pyridin	108-89-4	367	744	433	743	0,05	772
35.	502	2-Chlor-2-Propen-Nitril	920-37-6	853	938	897	3.146	0,21	—
36.	506	2,4-Pentadien-Nitril	1.615-70-9	762	917	823	12.815	0,86	—
37.	511	?					12.804	0,86	—
38.									
39.	538	?					5.277	0,36	—
40.	546	3-Penten-1-in	2.206-23-7	509	841	548	4.033	0,27	—
41.	554	Toluol	108-88-3	912	962	931	620.048	41,73	193
42.	566	2-Methyl-Thiophen	554-14-3	627	940	648	2.610	0,18	—
43.	573	2-Furan-Carbonitril	617-90-3	628	994	628	2.094	0,14	—
44.	595	2-Methylen-4-Penten-Nitril	28.769-50-8	501	814	523	1.383	0,09	—
45.	597	1,5-Heptadien-3-in	3.511-27-1	505	859	538	1.730	0,12	—
46.	637	Hexamethyl-Cyclotrisiloxan	541-05-9	828	960	835	8.358	0,56	—
47.	655	Chlor-Benzol	108-90-7	927	988	927	40.531	2,73	133
48.	665	2-Methyl-Pyridin	109-06-8	404	843	444	2.015	0,14	770
49.	678	Ethyl-Benzol	100-41-4	905	980	915	40.372	2,72	11
50.	689	Ethinyl-Benzol	536-74-3	636	975	636	206.940	13,93	—
51.	710	Styrol	100-42-5	944	986	952	552.789	37,20	189
52.	717	<i>o</i> -Xylol	95-47-6				38.170	2,57	208a
53.	754	?					895	0,06	—
54.	775	2-Propenyl-Benzol; Allyl-Benzol	300-57-2	820	971	820	4.795	0,32	—
55.	784	4-Chlor-Toluol	106-43-4	653	979	653	585	0,04	235b
56.	787	<i>trans</i> -2-Hydroxy-Zimtsäure; <i>o</i> -Cumarsäure	614-60-8	675	938	703	1.340	0,09	—
57.	796	Isocyano-Benzol	931-54-4				920.422	61,94	—
58.	813	1-Propenyl-Benzol; β -Methyl-Styrol	637-50-3				18.540	1,25	—
59.	828	Benzo-[<i>b</i>]-Furan	271-89-6	771	903	771	69.083	4,65	—
60.	835	1,1,3,3,5,5-Hexamethyl-Trisiloxan	1.189-93-1				3.276	0,22	—

Ifd. Nr.	t _R [sec]	Substanz	CARN	MS-Werte			Peak-fläche	rel.Fl. [%]	H.-Nr. [20]
				Pur	Fit	Rfit			
61.	859	?					5.648	0,38	—
62.	878	1-Propinyl-Benzol; 1-Phenyl-1-Propin	673-32-5	886	979	896	46.268	3,11	—
63.	886	3-Cyano-Toluol	620-22-4	737	892	737	9.495	0,64	—
64.	905	4-Isocyano-Toluol	7.175-47-5	553	939	572	730	0,05	—
65.	926	?					1.188	0,08	—
66.	932	7-Methyl-Benzo-[b]-Furan	17.059-52-8	791	989	791	2.614	0,18	—
67.	976	1-Methyl-2-Cyclopropen-1-yl-Benzol	65.051-83-4	522	929	541	1.395	0,09	—
68.	980	?					2.248	0,15	—
69.	1.008	Naphthalin	91-20-3	894	985	894	19.492	1,31	140
70.									
71.	1.013	Benzo-Thiophen	95-15-8	519	903	539	3.241	0,22	—
72.									

Tabelle 16: Die Identifikationsvorschläge der NIST-Massenspektrenbibliothek für die auf Tenax-TA-Adsorptionsröhrchen angereicherten Rauchgasbestandteile von Pyramin WG

Ifd. Nr.	t _R [sec]	Substanz	CARN	MS-Werte			Peak-fläche	rel.Fl. [%]	H.-Nr. [20]
				Pur	Fit	Rfit			
1.	253	Methyl-Silan	992-94-9				575	0,01	—
2.	261	Luft					2.316	0,05	—
3.	265	?					799	0,02	—
4.									
5.	274	1,3-Butadien	106-99-0	521	621	664	2.917	0,06	44
6.									
8.	288	Propen	115-07-1	769	821	834	7.316	0,16	169
9.	294	?					517	0,01	—
10.									
12.	303	2-Propen-Nitril	107-13-1	745	749	979	155.311	3,39	5
13.									
14.	322	Schwefel-Kohlenstoff; Kohlenstoff-Disulfid	75-15-0	303	373	374	117.979	2,58	181
15.	329	2-Butin	503-17-3	712	761	804	28.330	0,62	697
16.									
17.	345	4,5-Dihydro-3,5-Dimethyl- (3H-Furan-2-on)	5.145-01-7	521	736	619	15.459	0,34	—
18.	349	4-Methyl-1-Pentin	7.154-75-8				14.508	0,32	—
19.	366	2-Chlor-2-Propen-Nitril	920-37-6	733	953	759	53.867	1,18	—
20.	374	3-Methyl-Furan	930-27-8				9.802	0,21	—
21.	389	2-Buten-Nitril	4.786-20-3	894	916	958	15.381	0,34	—

Tabelle 17: Die Identifikationsvorschläge der NIST-Massenspektrenbibliothek für die auf Carbotrap-300-Adsorptionsröhrchen angereicherten Rauchgasbestandteile von Rubitox

lfd. Nr.	t _R [sec]	Substanz	CARN	MS-Werte			Peak-fläche	rel.Fl. [%]	H.-Nr. [20]
				Pur	Fit	Rfit			
1.	254	Dimethyl-Amin	124-40-3	798	828	932	575	0,03	85
2.	260	Luft					1.253.810	75,04	—
3.	265	?					62.461	3,74	—
4.	272	2,5-Dihydro-Thiophen-1,1-Dioxid	77-79-2	523	630	648	15.258	0,91	—
5.	269	?					11.651	0,70	—
6.	278	?					4.050	0,24	—
7.	281	?					4.516	0,27	—
8.	292	4-Methyl-3-Pentensäure	504-85-8	798	826	894	8.391	0,50	—
9.	299	Furan	110-00-9	762	886	845	8.092	0,48	703
10.	304	?					7.862	0,47	—
11.	310	Essigsäure-Methylester	79-20-9	746	905	815	4.391	0,26	378
12.	321	Schwefel-Kohlenstoff; Kohlenstoff-Disulfid	75-15-0	904	907	990	1.234.717	73,90	181
13.	342	1-Propan-Sulfonyl-Chlorid	10.147-36-1	280	444	459	2.335	0,14	—
14.	363	2-Methyl-Furan	534-22-5	537	831	640	948	0,06	526
15.	367	4-Acetyl-Oxy-2-Butanon	10.150-87-5	704	846	734	1.695	0,10	—
16.									
17.	397	1,5-Hexadiin	628-16-0	445	861	500	394	0,02	—
18.	402	2-Methyl-1-Penten-3-in	926-55-6	549	792	571	120	0,01	—
19.									
20.	421	Benzol	71-43-2	963	979	977	1.670.806	100	39
21.	426	Thiophen	110-02-1	900	982	910	283.859	16,99	901
22.									
23.	473	2,5-Dimethyl-Furan	625-86-5	557	846	617	561	0,03	—
24.	482	1,2-Thiazol	288-16-4	741	968	755	4.691	0,28	—
25.	492	4-Methyl-Pyridin	108-89-4	322	645	417	1.029	0,06	772
26.	509	2,4-Pentadien-Nitril	1.615-70-9	618	892	684	1.562	0,09	—
27.	519	Dimethyl-Disulfid	624-92-0	742	957	763	2.546	0,15	622
28.									
30.	553	Toluol	108-88-3	907	963	926	339.892	20,34	193
31.	567	2-Methyl-Thiophen	554-14-3	816	972	874	12.608	0,75	—
32.	598	2-Propenyliden-Cyclobuten	52.097-85-5	407	764	412	428	0,03	—
33.	636	Hexamethyl-Cyclotrisiloxan	541-05-9	334	826	364	1.624	0,10	—
34.	654	Chlor-Benzol	108-90-7	834	988	834	11.749	0,70	133
35.	662	2-Chlor-Thiophen	96-43-5	783	982	783	3.579	0,21	—
36.	677	Ethyl-Benzol	100-41-4	825	961	836	1.870	0,11	11
37.	688	Ethynyl-Benzol	536-74-3	621	968	621	29.046	1,74	—
38.	710	Styrol	100-42-5	936	985	944	39.931	2,39	189
39.	716	<i>o</i> -Xylol	95-47-6	795	904	809	5.560	0,33	208a
40.	778	Benz-Aldehyd	100-52-7	786	948	817	2.784	0,17	302

Ifd. Nr.	t _R [sec]	Substanz	CARN	MS-Werte			Peak-fläche	rel.Fl. [%]	H.-Nr. [20]
				Pur	Fit	Rfit			
41.	783	2-Chlor-1-Phenyl-Ethanon	532-27-4	614	783	658	394	0,02	949
42.									
43.	795	Isocyano-Benzol	931-54-4				25.343	1,52	—
⋮									
46.	827	Benzo-[b]-Furan	271-89-6	659	890	684	3.902	0,23	—
⋮									
49.	878	1-Propinyl-Benzol; 1-Phenyl-1-Propin	673-32-5	811	972	818	2.330	0,14	—
50.	886	4-Cyano-Toluol	104-85-8				512	0,03	—
51.	905	?					130	0,01	—
⋮									
57.	1.008	Naphthalin	91-20-3	850	913	892	1.845	0,11	140
58.	1.055	?					396	0,02	—
59.	1.094	?					210	0,01	—

Tabelle 18: Die Identifikationsvorschläge der NIST-Massenspektrenbibliothek für die auf Carbotrap-400-Adsorptionsröhrchen angereicherten Rauchgasbestandteile von Rubitox

Ifd. Nr.	t _R [sec]	Substanz	CARN	MS-Werte			Peak-fläche	rel.Fl. [%]	H.-Nr. [20]
				Pur	Fit	Rfit			
1.	254	Dimethyl-Amin	124-40-3				649	0,06	85
2.	260	Luft					332.423	32,79	—
3.	265	3-Penten-1-in	2.206-23-7	432	588	503	35.456	3,50	—
4.	274	2,5-Dihydro-Thiophen-1,1-Dioxid	77-79-2	555	612	726	11.387	1,12	—
⋮									
8.	293	4-Methyl-3-Pentensäure	504-85-8	712	783	817	1.911	0,19	—
9.	300	Furan	110-00-9				2.094	0,21	703
10.	305	3-(Ethyl-Oxy)-6-Methyl-Pyridin-2-Thion	40.585-12-4	488	678	618	4.935	0,49	—
11.	311	Essigsäure-Methylester	79-20-9	521	851	581	2.901	0,29	378
12.	321	Schwefel-Kohlenstoff; Kohlenstoff-Disulfid	75-15-0	889	894	986	235.032	23,18	181
13.	344	?					652	0,06	—
14.	363	2-Methyl-Furan	534-22-5	306	697	425	368	0,04	526
⋮									
17.	398	1,5-Hexadiin	628-16-0	679	945	700	1.000	0,10	—
18.	402	5-Methyl-1,3-Cyclopentadien	96-38-8	723	850	781	796	0,08	—
19.	406	1-Methyl-1,3-Cyclopentadien	96-39-9	577	917	616	546	0,05	—
20.	421	Benzol	71-43-2	958	975	972	1.013.741	100	39
21.	426	Thiophen	110-02-1	788	974	798	83.706	8,26	901
22.	465	?					4.491	0,44	—

Tabelle 19: Die Identifikationsvorschläge der NIST-Massenspektrenbibliothek für die auf Tenax-TA-Adsorptionsröhrchen angereicherten Rauchgasbestandteile von Rubitox

Ild. Nr.	t _R [sec]	Substanz	CARN	MS-Werte			Peak-fläche	rel.Fl. [%]	H.-Nr. [20]
				Pur	Fit	Rfit			
1.	252	Dimethyl-Amin	124-40-3				351	0,03	85
2.	260	Luft					3.847	0,32	—
3.									
4.	273	1-Buten-3-in	689-97-4	672	802	715	1.455	0,12	—
5.									
6.	279	1,3-Butadiin	460-12-8	692	894	739	255	0,02	—
7.									
9.	300	Furan	110-00-9	670	881	745	258	0,02	703
10.	304	3-Methyl-1-Butin	598-23-2	431	452	538	16.997	1,43	—
11.	314	2-Propen-Nitril	107-13-1	653	723	891	1.977	0,17	5
12.	321	Schwefel-Kohlenstoff; Kohlenstoff-Disulfid	75-15-0	830	870	930	42.046	3,53	181
13.	345	1,3-Cyclopentadien	542-92-7	572	824	590	3.838	0,32	—
14.	363	2-Methyl-Furan	534-22-5	708	862	811	4.321	0,36	526
15.									
16.	373	Azido-Benzol	622-37-7	360	634	443	2.971	0,25	—
17.	398	1,5-Hexadien-3-in	821-08-9	933	972	933	7.573	0,64	—
18.	402	1,3-Cyclohexadien	592-57-4	692	868	731	1.270	0,11	—
19.	406	2-Hexen-4-in	14.092-20-7	704	870	732	1.296	0,11	—
20.	421	Benzol	71-43-2	958	976	972	1.190.542	100	39
21.	426	Thiophen	110-02-1	861	981	871	231.734	19,46	901
22.	466	?					1.252	0,11	—
23.	473	2,5-Dimethyl-Furan	625-86-5	444	711	507	446	0,04	—
24.	481	?					3.044	0,26	—
25.									
26.	507	2,4-Pentadien-Nitril	1.615-70-9	712	910	774	1.699	0,14	—
27.	519	Dimethyl-Disulfid	624-92-0				941	0,08	622
28.									
30.	553	Toluol	108-88-3	907	961	926	246.589	20,71	193
31.	567	2-Methyl-Thiophen	554-14-3	853	969	868	9.899	0,83	—
32.	597	2-Propenyliden-Cyclobuten	52.097-85-5	639	952	655	565	0,05	—
33.	636	Hexamethyl-Cyclotrisiloxan	541-05-9				281	0,02	—
34.	654	Chlor-Benzol	108-90-7	869	981	875	7.672	0,64	133
35.	663	2-Chlor-Thiophen	96-43-5	813	972	813	3.091	0,26	—
36.	677	Ethyl-Benzol	100-41-4	726	890	774	833	0,07	11
37.	688	Ethynyl-Benzol	536-74-3	799	989	799	23.798	2,00	—
38.	710	Styrol	100-42-5	932	984	940	24.827	2,09	189
39.	716	o-Xylol	95-47-6	717	831	731	2.295	0,19	208a
40.	775	Benz-Aldehyd	100-52-7				143	0,01	302
41.	785	?					196	0,02	—

Ifd. Nr.	t _R [sec]	Substanz	CARN	MS-Werte			Peak-fläche	rel.Fl. [%]	H.-Nr. [20]
				Pur	Fit	Rfit			
42.									
43.	797	Isocyano-Benzol	931-54-4				3.559	0,30	—
:									
46.	828	Benzo-[b]-Furan	271-89-6	574	834	622	1.240	0,10	—
47.	856	?					158	0,01	—
48.	869	?					127	0,01	—
49.	878	1-Propinyl-Benzol; 1-Phenyl-1-Propin	673-32-5				904	0,08	—
50.	888	4-Cyano-Toluol	104-85-8				178	0,01	—
:									
53.	932	7-Methyl-Benzo-[b]-Furan	17.059-52-8				109	0,01	—
:									

Tabelle 20: Die Identifikationsvorschläge der NIST-Massenspektrenbibliothek für die auf Carbotrap-300-Adsorptionsröhrchen angereicherten Rauchgasbestandteile von Tribunil

Ifd. Nr.	t _R [sec]	Substanz	CARN	MS-Werte			Peak-fläche	rel.Fl. [%]	H.-Nr. [20]
				Pur	Fit	Rfit			
1.	254	Dimethyl-Amin	124-40-3	816	843	944	1.612	0,21	85
2.	260	Luft					529.121	70,31	—
3.	271	Isobuten	115-11-7	700	739	778	19.711	2,62	389
4.	274	?					7.644	1,02	—
5.	278	?					3.487	0,46	—
6.	286	Propen	115-07-1	680	788	739	24.480	3,25	169
7.									
8.	296	Tetrahydro-3-Methylen-2,5-Furandion	2.170-03-8	616	802	627	2.172	0,29	—
9.	299	Furan	110-00-9				7.460	0,99	703
10.	303	?					25.242	3,35	—
11.	312	3-Methyl-2-Methylen-Butan-Nitril	2.813-69-6	510	595	703	4.269	0,57	—
12.	320	Schwefel-Kohlenstoff; Kohlenstoff-Disulfid	75-15-0	883	893	982	307.035	40,80	181
13.	330	1,4-Butan-Dinitril	110-61-2	413	449	468	1.942	0,26	—
14.	332	1,2-Heptadien	2.384-90-9	460	692	529	2.405	0,32	—
15.	344	N-Methyl-3-Amino-Propan-Nitril	693-05-0	340	670	491	1.561	0,21	—
:									
18.	358	1-Hexen	592-41-6	646	738	735	676	0,09	520
19.	362	2-Methyl-Furan	534-22-5	816	878	926	3.561	0,47	526
20.	372	3-Methyl-Furan	930-27-8				1.119	0,15	—
21.	382	(1-Methyl-Ethyliden)-Cyclopropan	4.741-86-0	430	681	551	462	0,06	—
22.	397	1,5-Hexadiin	628-16-0	418	856	466	610	0,08	—

Tabelle 21: Die Identifikationsvorschläge der NIST-Massenspektrenbibliothek für die auf **Carbotrap-400**-Adsorptionsröhrchen angereicherten Rauchgasbestandteile von **Tribunil**

Ifd. Nr.	t _R [sec]	Substanz	CARN	MS-Werte			Peak-fläche	rel.Fl. [%]	H.-Nr. [20]
				Pur	Fit	Rfit			
1.									
2.	260	Luft					412.849	83,19	—
3.	272	Isobuten	115-11-7	732	772	813	49.320	9,94	389
4.	275	?					25.499	5,14	—
5.	278	?					11.449	2,31	—
6.	287	Propen	115-07-1	609	754	622	59.878	12,07	169
7.									
8.	297	Tetrahydro-3-Methylen-2,5-Furandion	2.170-03-8	695	887	707	4.130	0,83	—
9.	300	Furan	110-00-9	801	869	889	24.555	4,95	703
10.	304	?					27.422	5,53	—
11.	313	4,5-Dihydro-3,5-Dimethyl- -(3H-Furan-2-on)	5.145-01-7	715	820	774	2.874	0,58	—
12.	321	Schwefel-Kohlenstoff; Kohlenstoff-Disulfid	75-15-0	878	891	975	657.708	133,00	181
13.	329	2-Butin	503-17-3	386	667	479	9.258	1,87	697
14.	334	?					8.930	1,80	—
15.	342	1,2-Heptadien	2.384-90-9	450	756	547	1.502	0,30	—
16.	345	trans-1,3-Pentadien	504-60-9	568	868	640	2.195	0,44	—
17.	349	Isobuten-Nitril	126-98-7	634	871	722	1.524	0,31	1423
18.									
19.	364	2-Methyl-Furan	534-22-5	634	871	722	4.827	0,97	526
20.	372	3-Methyl-Furan	930-27-8				885	0,18	—
21.	386	N-Butyliden-Ethan-Amin	1.611-12-7	515	744	544	545	0,11	—
22.	398	?					185	0,04	—
23.	403	1,3-Cyclohexadien	592-57-4	767	952	722	1.048	0,21	—
24.	406	1-Methyl-1,3-Cyclopentadien	96-39-9	766	955	770	637	0,13	—
25.	422	Benzol	71-43-2	951	970	965	496.244	100	39
26.	427	Thiophen	110-02-1	861	978	871	48.668	9,81	901
27.	448	Thio-Cyansäure-Methylester; Methyl-Thio-Cyanat	556-64-9	640	922	679	551	0,11	—
28.	458	?					589	0,12	—
29.	466	trans-1-Propenyl-Oxy-Prop-2-en	61.142-13-0	407	676	532	307	0,06	—
30.	473	2,5-Dimethyl-Furan	625-86-5	581	860	641	1.373	0,28	—
31.	484	3-Methyl-2-Cyclopenten-1-on	2.758-18-1	404	829	423	642	0,13	—
32.	491	Isothio-Cyansäure-Methylester; Methyl-Isothio-Cyanat	556-61-6	834	984	843	20.471	4,13	947
33.									
34.	516	Dimethyl-Disulfid	624-92-0	956	979	967	25.117	5,06	622
:									
37.	553	Toluol	108-88-3	908	961	928	273.965	55,21	193
38.	566	2-Methyl-Thiophen	554-14-3	716	953	742	6.933	1,40	—

Ifd. Nr.	t _R [sec]	Substanz	CARN	MS-Werte			Peak-fläche	rel.Fl. [%]	H.-Nr. [20]
				Pur	Fit	Rfit			
39.	595	2,2-Dimethyl-4-Pentenal	5.497-67-6				645	0,13	—
40.	618	Cyclohexan-Ethanol-Acetat	21.722-83-8	224	753	276	305	0,06	—
41.	637	Hexamethyl-Cyclotrisiloxan	541-05-9				100	0,02	—
42.	678	Ethyl-Benzol	100-41-4	903	977	914	12.222	2,46	11
43.	689	Ethynyl-Benzol	536-74-3	532	956	532	47.184	9,51	—
44.	710	Styrol	100-42-5	921	983	930	75.532	15,22	189
45.	717	<i>o</i> -Xylol	95-47-6	790	930	804	13.352	2,69	208a
46.	754	1,2,2-Trimethyl-3-Butenyl-Benzol	61.142-17-4	395	853	414	581	0,12	—
47.	778	Benz-Aldehyd	100-52-7				796	0,16	302
48.	795	Isocyano-Benzol	931-54-4				1.057.249	213,05	—
49.	804	Cyano-Benzol; Benzo-Nitril	100-47-0				30.058	6,06	417
50.	813	1-Propenyl-Benzol; β -Methyl-Styrol	637-50-3				1.485	0,30	—
51.	820	?					2.701	0,54	—
52.	828	Benzo-[<i>b</i>]-Furan	271-89-6	669	866	682	17.308	3,49	—
53.									
54.	859	1-(3,4-Dimethyl-Phenyl)-2-Amino-Propan	102-31-8	598	890	628	1.876	0,38	—
55.	879	1-Propinyl-Benzol; 1-Phenyl-1-Propin	673-32-5	892	979	903	21.671	4,37	—
56.	885	4-Cyano-Toluol	104-85-8	895	984	895	17.355	3,50	—
57.	904	3-Cyano-Toluol	620-22-4	732	933	768	1.256	0,25	—
58.	917	?					953	0,19	—
59.	932	3-Phenyl-Acrolein	104-55-2	852	973	864	1.241	0,25	—
60.	977	1-Methyl-2-Cyclopropen-1-yl-Benzol	65.051-83-4	852	973	864	2.625	0,53	—
61.	981	?					2.561	0,52	—
62.	991	Isochinolin; Benzo-[<i>c</i>]-Pyridin	119-65-3	726	951	733	2.297	0,46	—
63.	1.009	Naphthalin	91-20-3	895	985	895	33.650	6,78	140
64.	1.013	Benzo-Thiophen	95-15-8	718	973	718	15.355	3,09	—
65.	1.035	Benzo-1,3-Thiazol	95-16-9	778	997	778	8.198	1,65	—
66.	1.102	1-Ethyliden-(<i>1H</i> -Inden)	2.471-83-2	493	894	538	936	0,19	—
67.	1.116	1,4-Dihydro-1,4-Methano-Naphthalin	4.453-90-1	464	868	525	716	0,14	—
68.	1.164	Acenaphten; 1,2-Dihydro-Acenaphthylen	83-32-9	350	884	381	661	0,13	1289
69.	1.218	?					1.035	0,21	—
70.	1.236	Biphenylen	259-79-0	684	965	701	100	0,02	—

Tabelle 22: Die Identifikationsvorschläge der NIST-Massenspektrenbibliothek für die auf Tenax-TA-Adsorptionsröhrchen angereicherten Rauchgasbestandteile von Tribunil

lfd. Nr.	t _R [sec]	Substanz	CARN	MS-Werte			Peak-fläche	rel.Fl. [%]	H.-Nr. [20]
				Pur	Fit	Rfit			
1.	252	N-Methyl-1,2-Diamino-Ethan	109-81-9	522	701	591	755	0,05	—
2.	260	Luft					3.416	0,21	—
3.	271	Isobuten	115-11-7				105	0,01	389
4.									
5.	279	?					44	3·10 ⁻³	—
6.									
7.	292	2-Methyl-1-Nitro-Propan	625-74-1	748	871	753	6.089	0,37	—
8.									
9.	299	Furan	110-00-9	570	862	618	272	0,02	703
10.	305	2-Propen-Nitril	107-13-1	653	737	871	4.326	0,26	5
11.									
12.	321	Schwefel-Kohlenstoff; Kohlenstoff-Disulfid	75-15-0	839	877	937	25.325	1,52	181
13.	329	2-Butin	503-17-3	505	754	576	2.782	0,17	697
14.									
15.									
16.	344	1-Penten-3-in	646-05-9	736	866	829	1.070	0,06	—
17.	349	2-Ethyl-Butanal	97-96-1	587	818	676	2.130	0,13	550
18.									
19.	363	2-Methyl-Furan	534-22-5	728	855	847	3.385	0,20	526
20.	372	3-Methyl-Furan	930-27-8	399	758	481	1.670	0,10	—
21.	388	2-Buten-Nitril	4.786-20-3	795	917	854	1.454	0,09	—
22.	398	1,5-Hexadiin	628-16-0	619	957	632	2.354	0,14	—
23.	402	2-Hexen-4-in	14.092-20-7	763	890	792	3.073	0,18	—
24.	405	1,3-Cyclohexadien	592-57-4	759	926	803	1.865	0,11	—
25.	420	Benzol	71-43-2	953	975	967	1.665.174	100	39
26.	426	Thiophen	110-02-1	890	981	900	162.633	9,77	901
27.	449	Thio-Cyansäure-Methylester; Methyl-Thio-Cyanat	556-64-9				1.756	0,11	—
28.	458	1,4-Cyclohexadien	628-41-1	852	949	881	2.357	0,14	—
29.	465	2-Ethyl-Furan	3.208-16-0	556	814	664	1.139	0,07	—
30.	472	2,5-Dimethyl-Furan	625-86-5	733	872	811	8.548	0,51	—
31.									
32.	490	Isothio-Cyansäure-Methylester; Methyl-Isothio-Cyanat	556-61-6				10.631	0,64	947
33.	503	1-Methyl-Pyrrol	96-54-8	718	842	775	26.752	1,61	—
34.	518	Dimethyl-Disulfid	624-92-0				4.418	0,27	622
35.	534	?					1.965	0,12	—
36.	538	2,4-Pentadien-Nitril	1.615-70-9	584	876	649	3.541	0,21	—
37.	552	Toluol	108-88-3	912	962	931	854.808	51,33	193
38.	565	2-Methyl-Thiophen	554-14-3	840	971	855	22.096	1,33	—

Tabelle 23: Die Arbeitsprotokolle in der Versuchsreihe 2 mit Carbotrap-400-, W.1-, W.2- und W.3-Adsorptionsröhrchen

	Dithane Ultra WG	Lentagran WP	Pyramin WG	Rubitox	Tribunil	unbehandeltes Fichtenholz
Masse PSM [kg]	0,822	0,307	1,043	0,474	0,484	./.
Masse Holz [kg]	2,131	2,056	2,019	2,065	2,077	2,035
Gaspumpe ein [min:sec]	4:40	4:00	4:15	4:20	4:10	3:45
Kamintemperatur [°C]	510	458	514	426	565	425
Gaspumpe aus [min:sec]	5:40	5:00	5:15	5:20	5:10	5:15
Kamintemperatur [°C]	507	420	533	425	574	422
Löschwasser ein [min:sec]	6:00	5:30	5:45	6:00	5:50	5:45
Löschwasser aus [min:sec]	6:20	5:45	6:00	6:10	6:05	5:55
Lüfter aus [min:sec]	6:30	7:30	7:20	7:30	7:00	6:30
Löschwasser ein [min:sec]	./.	6:45	13:10	7:00	7:15	./.
Löschwasser aus [min:sec]	./.	7:00	13:40	7:15	7:30	./.
Löschwasserbedarf [ℓ]	3	4	6,2	4	3,2	8
Besonderheiten	keine	keine	Schwierigkeiten beim Lötschen trotz neuer Löschvorrichtung	keine	starke Rußbildung	keine

Tabelle 24: Die Identifikationsvorschläge der NIST-Massenspektrenbibliothek für die auf Carbotrap-400-Adsorptionsröhrchen angereicherten Rauchgasbestandteile in der zweiten Versuchsreihe mit Dithane Ultra WG

Ild. Nr.	t _R [sec]	Substanz	CARN	MS-Werte			Peak-fläche	rel.Fl. [%]	H.-Nr. [20]
				Pur	Fit	Rfit			
1.	253	Dimethyl-Amin	124-40-3	835	849	969	193	0,04	85
2.	260	Luft					868.773	172,27	—
3.	272	2,5-Dihydro-Thiophen-1,1-Dioxid	77-79-2	561	705	731	21.969	4,36	—
4.	278	Isobuten	115-11-7	546	786	626	2.827	0,56	389
5.	287	Propen	115-07-1	569	758	715	24.633	4,88	169
6.	292	Isobutan	75-28-5				1.534	0,30	45
7.	296	2,5-Dihydro-(1H-Pyrrol)	109-96-6				1.061	0,21	—
8.	299	Furan	110-00-9	897	923	939	8.799	1,74	703
9.	302	3-Methyl-1,2-Butadien	598-25-4	588	624	640	29.985	5,95	—
10.	310	Essigsäure-Methylester	79-20-9	618	884	692	3.843	0,76	378
11.	320	Schwefel-Kohlenstoff; Kohlenstoff-Disulfid	75-15-0	909	950	953	7.331.937	1.454,9	181
12.	342	1-Propan-Thiol	107-03-9	388	664	519	5.702	1,13	1028
13.	349	1-Propan-Sulfonyl-Chlorid	10.147-36-1	367	720	489	3.207	0,64	—
14.	363	2-Methyl-Furan	534-22-5	623	843	725	1.601	0,32	526
15.	371	3-Methyl-Furan	930-27-8				605	0,12	—
:									
19.	402	2-Hexen-4-in	14.092-20-7	436	623	532	119	0,02	—
20.	405	?					144	0,03	—
21.	421	Benzol	71-43-2	952	973	966	504.307	100	39
22.	426	Thiophen	110-02-1	903	983	913	72.239	14,32	901
23.	439	1,5-Hexadiin	628-16-0	562	885	622	274	0,05	—
24.	448	Thio-Cyansäure-Methylester; Methyl-Thio-Cyanat	556-64-9	746	864	840	423	0,08	—
25.	458	?					340	0,07	—
26.	472	2,5-Dimethyl-Furan	625-86-5	513	843	576	516	0,10	—
27.	483	1,2-Thiazol	288-16-4	494	928	510	691	0,14	—
28.	492	Isothio-Cyansäure-Methylester; Methyl-Isothio-Cyanat	556-61-6	432	850	479	344	0,07	947
29.									
30.	515	Dimethyl-Disulfid	624-92-0	910	968	927	2.559	0,51	622
31.									
32.	552	Toluol	108-88-3	898	956	918	131.981	26,17	193
33.	564	2-Methyl-Thiophen	554-14-3	795	954	820	6.917	1,37	—
34.									
35.	636	Hexamethyl-Cyclotrisiloxan	541-05-9	565	805	664	211	0,04	—
36.	677	Ethyl-Benzol	100-41-4	652	906	686	723	0,14	11
37.	687	Ethynyl-Benzol	536-74-3	763	925	763	10.145	2,01	—
38.	694	?					355	0,07	—
39.	709	Styrol	100-42-5	885	994	885	11.274	2,24	189

Ifd. Nr.	t _R [sec]	Substanz	CARN	MS-Werte			Peak-fläche	rel.Fl. [%]	H.-Nr. [20]
				Pur	Fit	Rfit			
40.	715	<i>o</i> -Xylol	95-47-6	729	906	740	3.005	0,60	208a
41.	778	Benz-Aldehyd	100-52-7	529	882	582	399	0,08	302
42.	796	Isocyano-Benzol	931-54-4				1.789	0,35	—
43.	802	Cyano-Benzol; Benzo-Nitril	100-47-0				314	0,06	417
44.									
45.	811	1-Propenyl-Benzol; β -Methyl-Styrol	637-50-3				100	0,02	—
46.	826	Benzo-[<i>b</i>]-Furan	271-89-6				1.028	0,20	—
47.									
48.	877	1-Propinyl-Benzol; 1-Phenyl-1-Propin	673-32-5				572	0,11	—
49.									
50.	890	?					50	0,01	—
51.	924	3-Phenyl-Acrolein	104-55-2				71	0,01	—
52.	931	2-Methyl-Benzo-[<i>b</i>]-Furan	4.265-25-2				92	0,02	—
53.	974	1-Butinyl-Benzol	622-76-4				145	0,03	—
54.	982	?					82	0,02	—
55.	1.007	Naphthalin	91-20-3	322	729	431	282	0,06	140
56.									

Tabelle 25: Die Identifikationsvorschläge der NIST-Massenspektrenbibliothek für die auf W.1-Adsorptionsröhrchen angereicherten Rauchgasbestandteile von Dithane Ultra WG

Ifd. Nr.	t _R [sec]	Substanz	CARN	MS-Werte			Peak-fläche	rel.Fl. [%]	H.-Nr. [20]
				Pur	Fit	Rfit			
1.	254	Methyl-Silan	992-94-9	764	813	926	1.843	0,23	—
2.	259	Luft					995.060	125,56	—
3.	271	2,5-Dihydro-Thiophen-1,1-Dioxid	77-79-2	541	697	707	16.440	2,07	—
4.	277	Isobuten	115-11-7	381	747	442	468	0,06	389
5.	286	Propen	115-07-1	717	806	777	14.804	1,87	169
6.	292	Isobutan	75-28-5				1.592	0,20	45
7.	296	2,5-Dihydro-(1 <i>H</i> -Pyrrol)	109-96-6	662	760	669	175	0,02	—
8.	299	Furan	110-00-9	797	899	836	3.874	0,49	703
9.	302	3-Methyl-1-Butin	598-23-2	598	636	654	14.335	1,81	—
10.									
11.	320	Schwefel-Kohlenstoff; Kohlenstoff-Disulfid	75-15-0	906	921	971	3.336.461	421,02	181
12.	343	1-Penten-3-in	646-05-9	352	742	376	1.760	0,22	—
13.	348	3-Hexen-1-ol-Acetat	3.681-71-8	458	789	539	1.620	0,20	—
14.	363	2-Methyl-Furan	534-22-5	688	877	781	3.690	0,47	526
15.	371	3-Methyl-Furan	930-27-8	599	838	710	624	0,08	—

lfd. Nr.	t _R [sec]	Substanz	CARN	MS-Werte			Peak-fläche	rel. Fl. [%]	H.-Nr. [20]
				Pur	Fit	Rfit			
16.									
17.	389	Isobuten-Nitril	126-98-7	642	875	718	670	0,08	1423
18.	398	1,5-Hexadiin	628-16-0	797	937	835	1.337	0,17	—
19.	402	5-Methyl-1,3-Cyclopentadien	26.519-91-5	709	876	732	823	0,10	—
20.	406	1,2-bis-Methylen-Cyclobutan	14.296-80-1	762	795	814	487	0,06	—
21.	420	Benzol	71-43-2	950	975	962	792.471	100	39
22.	425	Thiophen	110-02-1	881	981	891	128.835	16,26	901
23.									
24.	446	Thio-Cyansäure-Methylester; Methyl-Thio-Cyanat	556-64-9	524	847	581	849	0,11	—
25.	458	?					422	0,05	—
26.	472	2,5-Dimethyl-Furan	625-86-5	788	910	846	2.166	0,27	—
27.	484	1,2-Thiazol	288-16-4	373	912	404	1.002	0,13	—
28.	490	Isothio-Cyansäure-Methylester; Methyl-Isothio-Cyanat	556-61-6	642	956	665	7.346	0,93	947
29.	497	4-Methyl-Pyridin	108-89-4				3.236	0,41	772
30.	517	Dimethyl-Disulfid	624-92-0				3.110	0,39	622
31.									
32.	552	Toluol	108-88-3	909	960	927	331.426	41,82	193
33.	565	2-Methyl-Thiophen	554-14-3	890	972	904	23.148	2,92	—
34.	597	2-Propenyliden-Cyclobuten	52.097-85-5	808	933	825	302	0,04	—
35.	632	Hexamethyl-Cyclotrisiloxan	541-05-9				913	0,12	—
36.	677	Ethyl-Benzol	100-41-4	803	958	825	4.273	0,54	11
37.	688	Ethynyl-Benzol	536-74-3	554	957	554	72.259	9,12	—
38.	694	?					2.888	0,36	—
39.	709	Styrol	100-42-5	922	984	931	90.362	11,40	189
40.	716	<i>o</i> -Xylol	95-47-6	732	939	742	13.611	1,72	208a
41.	777	Benz-Aldehyd	100-52-7	629	837	683	386	0,05	302
42.	795	Isocyano-Benzol	931-54-4				35.356	4,46	—
43.	802	Cyano-Benzol; Benzo-Nitril	100-47-0				3.330	0,42	417
44.									
45.	812	1-Propenyl-Benzol; β -Methyl-Styrol	637-50-3	677	904	677	3.211	0,41	—
46.	827	Benzo-[<i>b</i>]-Furan	271-89-6	709	865	721	18.030	2,28	—
47.	858	1,2,3-Trimethyl-Benzol	526-73-8	697	893	731	1.151	0,15	—
48.	878	1-Propinyl-Benzol; 1-Phenyl-1-Propin	673-32-5				19.504	2,46	—
49.	886	?					621	0,08	—
50.	892	1-(Methyl-Oxy)- 4-(2-Phenyl-Ethyl)-Benzol	10.310-21-5	493	654	605	601	0,08	—
51.	925	3-Phenyl-Acrolein	104-55-2	722	881	807	335	0,04	—
52.	932	2-Methyl-Benzo-[<i>b</i>]-Furan	4.265-25-2				765	0,10	—
53.	975	1-Butinyl-Benzol	622-76-4				311	0,04	—
54.	982	?					417	0,05	—
55.	1.008	Naphthalin	91-20-3	852	981	852	8.648	1,09	140
56.	1.013	Benzo-Thiophen	95-15-8	530	901	552	1.592	0,20	—

Tabelle 26: Die Identifikationsvorschläge der NIST-Massenspektrenbibliothek für die auf W.3-Adsorptionsröhrchen angereicherten Rauchgasbestandteile von Dithane Ultra WG

Ifd. Nr.	t _R [sec]	Substanz	CARN	MS-Werte			Peak-fläche	rel.Fl. [%]	H.-Nr. [20]	Konz. [mg/m ³]
				Pur	Fit	Rfit				
1.	254	Methyl-Silan	992-94-9	761	808	921	1.217	0,11	—	2,15
2.	260	Luft					1.006.548	92,87	—	
3.	271	?					2.627	0,24	—	55,13
4.	278	Isobuten	115-11-7	559	630	634	31.234	2,88	389	4,64
5.	286	Propen	115-07-1	542	692	589	55.266	5,10	169	97,54
6.	292	Isobutan	75-28-5	745	760	805	3.178	0,29	45	5,61
7.	296	2,5-Dihydro-(1H-Pyrrol)	109-96-6	691	767	703	2.674	0,25	—	4,72
8.	299	Furan	110-00-9				11.183	1,03	703	19,74
9.	302	2-Propen-Nitril	107-13-1	642	707	860	59.047	5,45	5	104,22
10.										
11.	320	Schwefel-Kohlenstoff; Kohlenstoff-Disulfid	75-15-0	913	948	953	6.562.356	605,5	181	11.582,6
12.	343	1-Penten-3-in	646-05-9	337	800	390	3.588	0,33	—	6,33
13.	348	3-Hexen-1-ol-Acetat	3.681-71-8	523	805	602	2.364	0,22	—	4,17
14.	362	2-Methyl-Furan	534-22-5	777	881	878	7.877	0,73	526	13,90
15.	371	3-Methyl-Furan	930-27-8	493	838	586	2.038	0,19	—	3,60
16.	382	?					386	0,04	—	0,68
17.	388	Isobuten-Nitril	126-98-7	713	910	765	1.147	0,11	1423	2,02
18.	397	1,5-Hexadien-3-in	821-08-9	755	952	763	3.725	0,34	—	6,57
19.	401	1,3-Cyclohexadien	592-57-4	633	884	676	1.936	0,18	—	3,42
20.	405	1-Methyl-1,3-Cyclopentadien	96-39-9	645	937	662	1.275	0,12	—	2,25
21.	420	Benzol	71-43-2	955	977	969	1.083.791	100	39	1.912,89
22.	425	Thiophen	110-02-1	908	984	918	165.714	15,29	901	292,49
23.	433	1,5-Hexadiin	628-16-0	582	876	623	2.946	0,27	—	5,20
24.	445	Thio-Cyansäure-Methylester; Methyl-Thio-Cyanat	556-64-9	506	880	557	1.155	0,11	—	2,04
25.	458	?					522	0,05	—	0,92
26.	472	2,5-Dimethyl-Furan	625-86-5	768	929	814	5.250	0,48	—	9,27
27.	484	1,2-Thiazol	288-16-4				851	0,08	—	1,50
28.	491	Isothio-Cyansäure-Methylester; Methyl-Isothio-Cyanat	556-61-6				9.022	0,83	947	15,92
29.	496	4-Methyl-Pyridin	108-89-4	316	866	345	4.345	0,40	772	7,67
30.	517	Dimethyl-Disulfid	624-92-0				4.318	0,40	622	7,62
31.	533	2-Propenyliden-Cyclobuten	52.097-85-5	749	919	782	651	0,06	—	1,15
32.	552	Toluol	108-88-3	904	962	922	776.040	71,60	193	1.369,71
33.	565	2-Methyl-Thiophen	554-14-3	890	973	903	40.015	3,69	—	70,63
34.	596	2-Propenyliden-Cyclobuten	52.097-85-5				1.227	0,11	—	2,17
35.	631	Hexamethyl-Cyclotrisiloxan	541-05-9				1.341	0,12	—	2,37
36.	676	Ethyl-Benzol	100-41-4	804	972	814	5.533	0,51	11	9,77
37.	687	Ethinyl-Benzol	536-74-3	553	960	553	89.243	8,23	—	157,51

Ifd. Nr.	t _R [sec]	Substanz	CARN	MS-Werte			Peak-fläche	rel.Fl. [%]	H.-Nr. [20]	Konz. [mg/m ³]
				Pur	Fit	Rfit				
38.	694	2,4-Dimethyl-Thiophen	638-00-6	482	946	482	3.432	0,32	—	6,06
39.	709	Styrol	100-42-5	916	983	925	99.750	9,20	189	176,06
40.	715	<i>o</i> -Xylol	95-47-6	826	939	838	17.906	1,65	208a	31,60
41.	777	Benz-Aldehyd	100-52-7	572	913	611	517	0,05	302	0,91
42.	795	Isocyano-Benzol	931-54-4				16.817	1,55	—	29,68
43.	801	Cyano-Benzol; Benzo-Nitril	100-47-0				1.184	0,11	417	2,09
44.	809	Propadienyl-Benzol	2.327-99-3	553	940	567	1.220	0,11	—	2,15
45.	812	1-Propenyl-Benzol; β -Methyl-Styrol	637-50-3	619	879	628	1.778	0,16	—	3,14
46.	826	Benzo-[<i>b</i>]-Furan	271-89-6	650	868	662	9.388	0,87	—	16,57
47.	858	1,2,3-Trimethyl-Benzol	526-73-8	622	840	708	435	0,04	—	0,77
48.	877	1-Propinyl-Benzol; 1-Phenyl-1-Propin	673-32-5				8.245	0,76	—	14,55
49.										
50.	892	?					149	0,01	—	0,26
51.	925	3-Phenyl-Acrolein	104-55-2				71	0,01	—	0,13
52.	931	2-Methyl-Benzo-[<i>b</i>]-Furan	4.265-25-2	241	821	272	134	0,01	—	0,24
53.	976	1-Butinyl-Benzol	622-76-4				43	4·10 ⁻³	—	0,08
54.	986	?					90	0,01	—	0,16
55.	1.008	Naphthalin	91-20-3	787	980	787	2.245	0,21	140	3,96
56.										

Tabelle 27: Die Identifikationsvorschläge der NIST-Massenspektrenbibliothek für die auf Carbotrap-400-Adsorptionsröhrchen angereicherten Rauchgasbestandteile in der zweiten Versuchsreihe mit Lentagran WP

Ifd. Nr.	t _R [sec]	Substanz	CARN	MS-Werte			Peak-fläche	rel.Fl. [%]	H.-Nr. [20]
				Pur	Fit	Rfit			
1.	255	Dimethyl-Amin	124-40-3	823	850	957	1.659	0,44	85
2.	260	Luft					285.722	76,55	—
3.	265	?					12.884	3,45	—
4.	272	2,5-Dihydro-Thiophen-1,1-Dioxid	77-79-2	616	730	791	20.884	5,60	—
5.	293	Isobutan	75-28-5	658	678	865	1.182	0,32	45
6.	299	Furan	110-00-9	761	880	802	1.391	0,37	703
7.	306	3-Methyl-1,2-Butadien	598-25-4	631	775	758	1.113	0,30	—
8.	321	Schwefel-Kohlenstoff; Kohlenstoff-Disulfid	75-15-0	878	894	971	50.556	13,55	181
9.	333	<i>trans</i> -1,3-Pentadien	504-60-9	566	819	645	313	0,08	—
10.	342	?					852	0,23	—
11.	358	4-Methyl-1-Penten	691-37-2	448	716	479	308	0,08	706
12.	363	2-Methyl-Furan	534-22-5	465	806	534	305	0,08	526

Ifd. Nr.	t _R [sec]	Substanz	CARN	MS-Werte			Peak-fläche	rel.Fl. [%]	H.-Nr. [20]
				Pur	Fit	Rfit			
13.	367	?					108	0,03	—
14.	382	1,1-Dimethyl-2-Methylen-Cyclopropan	4.372-94-5	546	847	620	140	0,04	—
15.	398	1,5-Hexadien-3-in	821-08-9	389	862	420	607	0,16	—
16.	402	2-Hexen-4-in	14.092-20-7	529	874	556	988	0,26	—
17.	406	1-Methyl-1,3-Cyclopentadien	96-39-9	627	972	631	769	0,21	—
18.	421	Benzol	71-43-2	951	972	964	373.226	100	39
19.	426	Thiophen	110-02-1	763	970	772	17.688	4,74	901
20.	462	2,3,3-Trimethyl-Cyclobutanon	28.290-01-9	690	871	723	952	0,26	—
21.	472	2,5-Dimethyl-Furan	625-86-5	745	897	787	410	0,11	—
22.									
23.	553	Toluol	108-88-3	907	960	926	186.321	49,92	193
24.	566	2-Methyl-Thiophen	554-14-3	667	919	711	1.903	0,51	—
25.									
26.	594	2,2-Dimethyl-4-Pental	5.497-67-6				3.078	0,82	—
27.									
28.	609	8-Hexyl-Hydroxyl-Amin	4.665-68-3	697	869	774	449	0,12	—
29.	636	Hexamethyl-Cyclotrisiloxan	541-05-9	353	888	385	330	0,09	—
30.	654	Chlor-Benzol	108-90-7	699	933	734	818	0,22	133
31.	677	Ethyl-Benzol	100-41-4	856	974	865	3.934	1,05	11
32.	688	Ethynyl-Benzol	536-74-3	653	977	653	24.958	6,69	—
33.	710	Styrol	100-42-5	941	985	949	37.056	9,93	189
34.	716	<i>o</i> -Xylol	95-47-6	846	907	862	4.507	1,21	208a
35.	777	Benz-Aldehyd	100-52-7	735	925	782	791	0,21	302
36.	796	Isocyano-Benzol	931-54-4				12.712	3,41	—
37.	813	1-Propenyl-Benzol; β -Methyl-Styrol	637-50-3	522	709	611	649	0,17	—
38.	827	Benzo-[<i>b</i>]-Furan	271-89-6	678	825	713	2.712	0,73	—
39.	859	?					60	0,02	—
40.	878	1-Propinyl-Benzol; 1-Phenyl-1-Propin	673-32-5				3.344	0,90	—
41.	886	?					94	0,03	—
42.	1.009	Naphthalin	91-20-3	649	915	684	897	0,24	140

lfd. Nr.	t _R [sec]	Substanz	CARN	MS-Werte			Peak-fläche	rel.Fl. [%]	H.-Nr. [20]	Konz. [mg/m ³]
				Pur	Fit	Rfit				
40.	879	1-Propinyl-Benzol; 1-Phenyl-1-Propin	673-32-5				4.166	1,50	—	7,35
41.										
42.	1.009	Naphthalin	91-20-3	589	868	652	571	0,21	140	1,01

Tabelle 30: Die Identifikationsvorschläge der NIST-Massenspektrenbibliothek für die auf Carbotrap-400-Adsorptionsröhrchen angereicherten Rauchgasbestandteile in der zweiten Versuchsreihe mit Pyramin WG

lfd. Nr.	t _R [sec]	Substanz	CARN	MS-Werte			Peak-fläche	rel.Fl. [%]	H.-Nr. [20]
				Pur	Fit	Rfit			
1.	254	Methyl-Silan	992-94-9	771	813	924	182	0,02	—
2.	260	Luft					130.950	17,84	—
3.	265	1-Buten-3-in	689-97-4	589	676	639	115.422	15,72	—
4.	272	1,3-Butadien	106-99-0	527	586	612	31.545	4,30	44
5.	278	Isobuten	115-11-7	516	742	593	1.752	0,24	389
6.	287	Propen	115-07-1	633	754	687	34.543	4,71	169
7.	293	?					596	0,08	—
8.	297	Tetrahydro-3-Methylen-2,5-Furandion	2.170-03-8	689	897	701	862	0,12	—
9.	299	Furan	110-00-9	740	849	854	5.069	0,69	703
10.	302	2-Propen-Nitril	107-13-1				30.349	4,13	5
11.	312	?					2.662	0,36	—
12.	321	Schwefel-Kohlenstoff; Kohlenstoff-Disulfid	75-15-0	637	935	650	19.605	2,67	181
13.	329	2-Butin	503-17-3	681	744	758	1.943	0,26	697
14.	333	trans-1,3-Pentadien	504-60-9	586	613	700	1.805	0,25	—
15.	344	1-Penten-3-in	646-05-9	534	738	587	802	0,11	—
16.	349	4-Methyl-1-Pentin	7.154-75-8	516	730	640	916	0,12	—
17.	358	?					176	0,02	—
18.	363	2-Methyl-Furan	534-22-5	639	795	759	2.485	0,34	526
19.	371	3-Methyl-Furan	930-27-8				428	0,06	—
20.									
21.	397	Cyan-Essigsäure	372-09-8	449	721	457	111	0,02	344
22.	402	1,2-bis-Methylen-Cyclobutan	14.296-80-1	560	862	591	311	0,04	—
23.	406	2-Hexen-4-in	14.092-20-7	491	660	596	348	0,05	—
24.	420	Benzol	71-43-2	952	975	965	734.130	100	39
25.									
26.	445	Thio-Cyansäure-Methylester; Methyl-Thio-Cyanat	556-64-9	754	921	802	2.517	0,34	—
27.	472	2,5-Dimethyl-Furan	625-86-5	500	827	559	336	0,05	—

Ifd. Nr.	t _R [sec]	Substanz	CARN	MS-Werte			Peak-fläche	rel.Fl. [%]	H.-Nr. [20]
				Pur	Fit	Rfit			
28.	484	?					90	0,01	—
29.	502	2-Chlor-2-Propen-Nitril	920-37-6	569	815	676	209	0,03	—
30.	510	2,4-Pentadien-Nitril	1.615-70-9	493	781	566	942	0,13	—
31.	515	Dimethyl-Disulfid	624-92-0	582	878	654	1.027	0,14	622
32.	545	3-Penten-1-in	2.206-23-7	531	718	672	631	0,09	—
33.	552	Toluol	108-88-3	908	957	926	62.156	8,47	193
34.	565	2-Methyl-Thiophen	554-14-3				335	0,05	—
35.	593	2,2-Dimethyl-4-Pentalal	5.497-67-6				155	0,02	—
36.	628	<i>m</i> -Cresol; 3-Methyl-Phenol	108-39-4				84	0,01	118a
37.	635	Hexamethyl-Cyclotrisiloxan	541-05-9	804	903	850	851	0,12	—
38.	654	Chlor-Benzol	108-90-7	830	964	842	1.655	0,23	133
39.	669	?					83	0,01	—
40.	677	Ethyl-Benzol	100-41-4	849	971	860	3.106	0,42	11
41.	688	Ethynyl-Benzol	536-74-3	544	955	544	15.456	2,11	—
42.	709	Styrol	100-42-5	944	986	952	35.219	4,80	189
43.	716	<i>o</i> -Xylol	95-47-6	803	943	803	3.346	0,46	208a
44.	775	Cyclopropyl-Benzol	873-49-4	513	786	624	190	0,03	—
45.									
46.	795	Isocyano-Benzol	931-54-4	749	925	803	28.061	3,82	—
47.	812	1-Propenyl-Benzol; β -Methyl-Styrol	637-50-3	557	853	605	1.598	0,22	—
48.	827	Benzo-[<i>b</i>]-Furan	271-89-6	679	843	705	3.876	0,53	—
49.	835	1,1,3,3,5,5-Hexamethyl-Trisiloxan	1.189-93-1	459	790	538	636	0,09	—
50.	858	Benzol-Hexan-Amin	17.734-20-2	384	713	520	121	0,02	—
51.	870	4-Methylen-6-Hepten-2-ol	42.201-30-9	318	633	427	224	0,03	—
52.	878	1-Propinyl-Benzol; 1-Phenyl-1-Propin	673-32-5	801	972	811	1.969	0,27	—
53.	887	?					255	0,03	—
54.	904	4-Isocyano-Toluol	7.175-47-5				163	0,02	—
55.	931	?					125	0,02	—
56.	979	?					200	0,03	—
57.	1.008	Naphthalin	91-20-3	791	976	791	2.314	0,32	140
58.	1.013	Benzo-Thiophen	95-15-8				245	0,03	—

Tabelle 31: Die Identifikationsvorschläge der NIST-Massenspektrenbibliothek für die auf W.2-Adsorptionsröhrchen angereicherten Rauchgasbestandteile von Pyramin WG

Ifd. Nr.	t _R [sec]	Substanz	CARN	MS-Werte			Peak-fläche	rel.Fl. [%]	H.-Nr. [20]
				Pur	Fit	Rfit			
1.	253	Methyl-Silan	992-94-9	777	805	931	168	0,02	—
2.	259	Luft					41.572	5,69	—
3.	264	1,3-Butadiin	460-12-8	518	749	538	33.250	4,55	—
4.	271	1,3-Butadien	106-99-0	551	683	701	16.065	2,20	44
5.	278	Isobuten	115-11-7	620	762	722	973	0,13	389
6.	286	Propen	115-07-1	733	790	794	8.464	1,16	169
7.	292	?					1.793	0,25	—
8.	299	Furan	110-00-9	729	871	775	5.082	0,70	703
9.	303	2-Propen-Nitril	107-13-1				10.009	1,37	5
10.	305	3-Methyl-1-Butin	598-23-2	742	772	819	12.809	1,75	—
11.	312	4,5-Dihydro-3,5-Dimethyl- (3H-Furan-2-on)	5.145-01-7	519	735	591	2.896	0,40	—
12.	320	Schwefel-Kohlenstoff; Kohlenstoff-Disulfid	75-15-0				27.801	3,81	181
13.	329	2-Butin	503-17-3				1.779	0,24	697
14.	333	<i>trans</i> -1,3-Pentadien	504-60-9	726	814	739	1.523	0,21	—
15.	344	1-Penten-3-in	646-05-9	460	754	515	840	0,12	—
16.	349	4-Methyl-1-Pentin	7.154-75-8	508	786	577	1.363	0,19	—
17.									
18.	363	2-Methyl-Furan	534-22-5	607	804	714	2.626	0,36	526
19.	371	3-Methyl-Furan	930-27-8	691	802	820	747	0,10	—
20.	387	2-Buten-Nitril	4.786-20-3				78	0,01	—
21.	397	1,5-Hexadiin	628-16-0	446	845	511	309	0,04	—
22.	401	2-Hexen-4-in	14.092-20-7	645	820	713	806	0,11	—
23.	405	5-Methyl-1,3-Cyclopentadien	26.519-91-5	470	721	528	962	0,13	—
24.	419	Benzol	71-43-2	954	977	968	730.188	100	39
25.	425	Thiophen	110-02-1				9.155	1,25	901
26.	447	Thio-Cyansäure-Methylester; Methyl-Thio-Cyanat	556-64-9	648	894	702	797	0,11	—
27.	472	2,5-Dimethyl-Furan	625-86-5	429	811	482	102	0,01	—
28.									
29.	501	3-Butin-1-ol	927-74-2	339	447	571	97	0,01	—
30.	510	3-Penten-1-in	2.206-23-7	419	774	489	1.312	0,18	—
31.	515	Dimethyl-Disulfid	624-92-0	568	857	637	628	0,09	622
32.	546	1,3-Cyclopentadien	542-92-7	547	657	609	461	0,06	—
33.	552	Toluol	108-88-3	908	958	925	56.232	7,70	193
34.	565	2-Methyl-Thiophen	554-14-3				556	0,08	—
35.									
36.	629	<i>m</i> -Cresol; 3-Methyl-Phenol	108-39-4				72	0,01	118a
37.	635	Hexamethyl-Cyclotrisiloxan	541-05-9	767	886	860	208	0,03	—

lfd. Nr.	t _R [sec]	Substanz	CARN	MS-Werte			Peak-fläche	rel.Fl. [%]	H.-Nr. [20]
				Pur	Fit	Rfit			
38.	654	Chlor-Benzol	108-90-7	572	795	710	465	0,06	133
39.									
40.	676	Ethyl-Benzol	100-41-4	672	886	739	595	0,08	11
41.	688	Ethynyl-Benzol	536-74-3	693	974	696	2.742	0,38	—
42.	709	Styrol	100-42-5	856	985	864	2.937	0,40	189
43.	715	<i>o</i> -Xylol	95-47-6	340	729	390	381	0,05	208a
44.	774	?					55	0,01	—
45.	783	?					33	0,00	—
46.	796	Isocyano-Benzol	931-54-4				589	0,08	—
47.	813	1-Propenyl-Benzol; β -Methyl-Styrol	637-50-3				30	4·10 ⁻³	—
48.	827	Benzo-[<i>b</i>]-Furan	271-89-6				56	0,01	—
49.	835	1,1,3,3,5,5-Hexamethyl-Trisiloxan	1.189-93-1				37	0,01	—
50.									
51.	869	?					247	0,03	—
52.	877	1-Propinyl-Benzol; 1-Phenyl-1-Propin	673-32-5				44	0,01	—
:									

Tabelle 32: Die Identifikationsvorschläge der NIST-Massenspektrenbibliothek für die auf W.3-Adsorptionsröhrchen angereicherten Rauchgasbestandteile von Pyramin WG

lfd. Nr.	t _R [sec]	Substanz	CARN	MS-Werte			Peak-fläche	rel.Fl. [%]	H.-Nr. [20]	Konz. [mg/m ³]
				Pur	Fit	Rfit				
1.	253	Methyl-Silan	992-94-9	760	807	912	774	5·10 ⁻³	—	1,37
2.	259	Luft					431.026	2,57	—	
3.	264	1-Buten-3-in	689-97-4	637	726	688	339.923	2,02	—	599,96
4.	271	1,3-Butadien	106-99-0	562	721	701	57.212	0,34	44	100,98
5.	277	Isobuten	115-11-7	517	743	594	1.179	0,01	389	2,08
6.	286	Propen	115-07-1	547	730	593	85.080	0,51	169	150,17
7.	295	?					3.473	0,02	—	6,13
8.	298	Furan	110-00-9	530	667	631	12.077	0,07	703	21,32
9.	301	2-Propen-Nitril	107-13-1	707	730	933	180.024	1,07	5	317,74
10.										
11.	311	(1-Methyl-Butyl)-Acetat	626-38-0	497	815	588	7.242	0,04	—	12,78
12.	320	Schwefel-Kohlenstoff; Kohlenstoff-Disulfid	75-15-0	674	789	753	52.262	0,31	181	92,24
13.	327	2-Butin	503-17-3	685	772	767	7.418	0,04	697	13,09
14.	332	<i>trans</i> -1,3-Pentadien	504-60-9	677	819	708	2.390	0,01	—	4,22
15.	343	1-Penten-3-in	646-05-9	707	891	742	1.953	0,01	—	3,45
16.	347	4-Methyl-1-Pentin	7.154-75-8				2.282	0,01	—	4,03

Ifd. Nr.	t _R [sec]	Substanz	CARN	MS-Werte			Peak-fläche	rel.Fl. [%]	H.-Nr. [20]	Konz. [mg/m ³]
				Pur	Fit	Rfit				
17.										
18.	362	2-Methyl-Furan	534-22-5	600	791	690	9.531	0,06	526	16,82
19.	370	3-Methyl-Furan	930-27-8	489	765	589	1.081	0,01	—	1,91
20.	386	2-Buten-Nitril	4.786-20-3	794	912	852	1.634	0,01	—	2,88
21.	397	Isobuten-Nitril	126-98-7	621	902	672	328	2·10 ⁻³	1423	0,58
22.	401	1,4-Cyclohexadien	628-41-1	661	934	687	1.066	0,01	—	1,88
23.	404	1,3-Cyclohexadien	592-57-4	688	907	742	881	0,01	—	1,55
24.	419	Benzol	71-43-2	955	978	968	16,8·10 ⁶	100	39	29.655,6
25.	424	Thiophen	110-02-1	540	926	546	19.343	0,12	901	34,14
26.	443	Thio-Cyansäure-Methylester; Methyl-Thio-Cyanat	556-64-9	792	939	829	6.065	0,04	—	10,70
27.	471	2,5-Dimethyl-Furan	625-86-5	601	850	641	1.513	0,01	—	2,67
28.										
29.	503	2,4-Pentadien-Nitril	1.615-70-9	751	921	809	3.839	0,02	—	6,78
30.	508	?					4.016	0,02	—	7,09
31.	515	Dimethyl-Disulfid	624-92-0	415	895	451	950	0,01	622	1,68
32.	543	?					4.722	0,03	—	8,33
33.	551	Toluol	108-88-3	911	961	929	360.755	2,15	193	636,73
34.	564	2-Methyl-Thiophen	554-14-3				2.524	0,02	—	4,45
35.	595	2,2-Dimethyl-4-Pentalen	5.497-67-6				1.044	0,01	—	1,84
36.	630	m-Cresol; 3-Methyl-Phenol	108-39-4	526	881	584	360	2·10 ⁻³	118a	0,64
37.	634	Hexamethyl-Cyclotrisiloxan	541-05-9	803	959	812	4.311	0,03	—	7,61
38.	654	Chlor-Benzol	108-90-7	874	985	874	7.049	0,04	133	12,44
39.										
40.	675	Ethyl-Benzol	100-41-4	899	976	908	12.911	0,08	11	22,79
41.	686	Ethynyl-Benzol	536-74-3	760	984	760	96.028	0,57	—	169,49
42.	708	Styrol	100-42-5	940	984	949	144.409	0,86	189	254,88
43.	714	o-Xylol	95-47-6	783	919	795	10.523	0,06	208a	18,57
44.	773	2-Propenyl-Benzol; Allyl-Benzol	300-57-2	756	918	789	1.356	0,01	—	2,39
45.	781	Azido-Benzol	622-37-7	846	977	857	2.438	0,01	—	4,30
46.	794	Isocyano-Benzol	931-54-4				48.433	0,29	—	85,48
47.	811	1-Propenyl-Benzol; β-Methyl-Styrol	637-50-3				2.748	0,02	—	4,85
48.	825	Benzo-[b]-Furan	271-89-6	677	865	703	6.496	0,04	—	11,47
49.	833	1,1,3,3,5,5-Hexamethyl-Trisiloxan	1.189-93-1				1.087	0,01	—	1,92
50.										
51.	868	Limonen; 4-Isopropenyl-1-Methyl-Cyclohexen	138-86-3	440	884	479	2.705	0,02	760	4,77
52.	876	1-Propinyl-Benzol; 1-Phenyl-1-Propin	673-32-5	787	978	796	6.129	0,04	—	10,82
53.	889	?					139	1·10 ⁻³	—	0,25
57.	1.006	Naphthalin	91-20-3	754	981	754	3.103	0,02	140	5,48

Tabelle 33: Die Identifikationsvorschläge der NIST-Massenspektrenbibliothek für die auf Carbotrap-400-Adsorptionsröhrchen angereicherten Rauchgasbestandteile in der zweiten Versuchsreihe mit Rubitox

Ifd. Nr.	t _R [sec]	Substanz	CARN	MS-Werte			Peak-fläche	rel.Fl. [%]	H.-Nr. [20]
				Pur	Fit	Rfit			
1.	254	Dimethyl-Amin	124-40-3	773	844	896	993	1,31	85
2.	259	Luft					150.192	198,75	—
3.	264	?					9.344	12,36	—
4.	271	2,5-Dihydro-Thiophen-1,1-Dioxid	77-79-2	547	676	672	3.770	4,99	—
5.	292	Isobutan	75-28-5	684	800	740	400	0,53	45
6.	298	Furan	110-00-9	560	867	592	257	0,34	703
7.	305	2-Buten-Nitril	4.786-20-3	442	730	489	177	0,23	—
8.	311	1-Propan-Sulfonyl-Chlorid	10.147-36-1	445	628	627	250	0,33	—
9.	320	Schwefel-Kohlenstoff; Kohlenstoff-Disulfid	75-15-0	885	899	972	25.570	33,84	181
10.	342	Cyclobutanol	2.919-23-5	535	787	633	72	0,10	—
11.	362	2-Methyl-Furan	534-22-5				144	0,19	526
12.									
13.									
14.	401	?					74	0,10	—
15.									
16.	420	Benzol	71-43-2	951	972	966	75.570	100	39
17.	425	Thiophen	110-02-1	777	977	786	7.139	9,45	901
18.	432	Isobuten-Dinitril	922-64-5	350	762	389	196	0,26	—
19.	471	2,5-Dimethyl-Furan	625-86-5	184	733	218	66	0,09	—
20.	482	2,3-Dimethyl-2-Nitro-Butan	34.075-28-0	179	478	270	75	0,10	45
21.	506	2,4-Pentadien-Nitril	1.615-70-9				149	0,20	—
22.	514	Dimethyl-Disulfid	624-92-0	371	799	422	281	0,37	622
23.	552	Toluol	108-88-3	904	959	923	52.737	69,79	193
24.	567	2-Methyl-Thiophen	554-14-3				1.363	1,80	—
25.	654	Chlor-Benzol	108-90-7	840	985	840	3.123	4,13	133
26.	662	2-Chlor-Thiophen	96-43-5	583	915	631	654	0,87	—
27.	677	Ethyl-Benzol	100-41-4	722	944	731	1.558	2,06	11
28.	687	Ethinyl-Benzol	536-74-3	531	727	568	16.355	21,64	—
29.	709	Styrol	100-42-5	943	987	951	28.239	37,37	189
30.	715	<i>o</i> -Xylol	95-47-6	822	927	835	3.890	5,15	208a
31.	776	Benz-Aldehyd	100-52-7	834	928	885	1.114	1,47	302
32.	783	Harnstoff	2.048-50-2	291	601	418	1.114	1,47	—
33.	795	Isocyano-Benzol	931-54-4	692	924	738	3.562	4,71	—
34.	811	1-Propenyl-Benzol; β -Methyl-Styrol	637-50-3	581	882	604	758	1,00	—
35.	826	Benzo-[b]-Furan	271-89-6	653	846	678	5.807	7,68	—
36.	858	7-Ethyl-1,3,5-Cycloheptatrien	17.634-51-4	381	603	530	184	0,24	—
37.	877	1-Propinyl-Benzol; 1-Phenyl-1-Propin	673-32-5	776	975	787	4.731	6,26	—
38.	975	1-Butinyl-Benzol	622-76-4	298	687	393	181	0,24	—
39.	1.007	Naphthalin	91-20-3	892	977	892	3.960	5,24	140
40.	1.012	?					222	0,29	—

Tabelle 36: Die Identifikationsvorschläge der NIST-Massenspektrenbibliothek für die auf Carbotrap-400-Adsorptionsröhrchen angereicherten Rauchgasbestandteile in der zweiten Versuchsreihe mit Tribunil

Ifd. Nr.	t _R [sec]	Substanz	CARN	MS-Werte			Peak-fläche	rel.Fl. [%]	H.-Nr. [20]
				Pur	Fit	Rfit			
1.	254	Methyl-Silan	992-94-9	776	824	931	1.426	0,56	—
2.	260	Luft					179.582	69,96	—
3.									
4.	272	Isobuten	115-11-7	712	753	789	51.954	20,24	389
5.									
6.	278	?					4.539	1,77	—
7.									
8.	287	Propen	115-07-1	698	783	758	13.796	5,37	169
9.	292	?					4.301	1,68	—
10.	297	Tetrahydro-3-Methylen-2,5-Furandion	2.170-03-8	658	918	670	3.896	1,52	—
11.	299	Furan	110-00-9	771	909	816	10.646	4,15	703
12.	303	3-Methyl-1,2-Butadien	598-25-4	590	714	665	8.040	3,13	—
13.	306	3-Methyl-1-Butin	598-23-2	604	694	676	7.474	2,91	—
14.	313	4,5-Dihydro-3,5-Dimethyl- -(3H-Furan-2-on)	5.145-01-7	607	772	673	5.032	1,96	—
15.	321	Schwefel-Kohlenstoff; Kohlenstoff-Disulfid	75-15-0	846	884	929	88.644	34,53	181
16.	330	2-Butin	503-17-3				1.266	0,49	697
17.	333	<i>trans</i> -1,3-Pentadien	504-60-9	782	894	782	3.716	1,45	—
18.									
19.	345	?					865	0,34	—
20.	350	Isobuten-Nitril	126-98-7	396	783	470	286	0,11	1423
21.	358	Propyl-Cyclopropan	2.415-72-7	541	757	698	326	0,13	—
22.	363	2-Methyl-Furan	534-22-5	760	882	857	5.773	2,25	526
23.	372	3-Methyl-Furan	930-27-8	677	837	805	1.026	0,40	—
24.	378	(1-Methyl-Ethyliden)-Cyclopropan	4.741-86-0	547	709	677	366	0,14	—
25.	386	1,5-Heptadien-3,4-diol	51.945-98-3	583	750	607	249	0,10	—
26.	398	?					121	0,05	—
27.	402	1,4-Cyclohexadien	628-41-1	667	927	698	410	0,16	—
28.	406	2-Hexen-4-in	14.092-20-7	557	839	614	403	0,16	—
29.	421	Benzol	71-43-2	949	973	963	256.679	100	39
30.	426	Thiophen	110-02-1	730	967	739	16.036	6,25	901
31.	432	1,3-bis-Methylen-Cyclohexan	52.086-82-5	466	801	564	907	0,35	—
32.	447	Thio-Cyansäure-Methylester; Methyl-Thio-Cyanat	556-64-9	720	914	772	1.913	0,75	—
33.	463	1-(Methyl-Oxy)-2-Methyl-Butan	62.016-48-2	493	678	534	382	0,15	—
34.	466	?					84	0,03	—
35.	473	2,5-Dimethyl-Furan	625-86-5	736	907	792	1.560	0,61	—
36.	485	2-Vinyl-2-Butenal	20.521-42-0	643	761	792	399	0,16	—
37.	490	Isothio-Cyansäure-Methylester; Methyl-Isothio-Cyanat	556-61-6	779	982	788	9.450	3,68	947

Tabelle 37: Die Identifikationsvorschläge der NIST-Massenspektrenbibliothek für die auf W.1-Adsorptionsröhrchen angereicherten Rauchgasbestandteile von Tribunil

Ifd. Nr.	t _R [sec]	Substanz	CARN	MS-Werte			Peak-fläche	rel.Fl. [%]	H.-Nr. [20]
				Pur	Fit	Rfit			
1.	255	Methyl-Silan	992-94-9	775	818	929	507	0,06	—
2.	261	Luft					47.378	5,79	—
3.									
4.	272	Isobuten	115-11-7	742	774	824	22.280	2,72	389
5.	276	?					5.251	0,64	—
6.	279	?					2.754	0,34	—
7.	285	?					316	0,04	—
8.	288	Propen	115-07-1				6.054	0,74	169
9.									
10.	293	O-Isobutyl-Hydroxyl-Amin	5.618-62-2	671	712	775	9.482	1,16	—
11.	300	Furan	110-00-9	646	876	685	11.534	1,41	703
12.	304	3-Methyl-1-Butin	598-23-2	588	671	661	19.748	2,41	—
13.	307	trans-1,3-Pentadien	504-60-9	761	805	761	25.705	3,14	—
14.	314	4,5-Dihydro-3,5-Dimethyl- (3H-Furan-2-on)	5.145-01-7	665	812	727	7.917	0,97	—
15.	322	Schwefel-Kohlenstoff; Kohlenstoff-Disulfid	75-15-0	676	786	756	197.513	24,14	181
16.	330	2-Butin	503-17-3	475	769	541	2.526	0,31	697
17.	335	?					5.583	0,68	—
18.									
19.	346	1-Penten-3-in	646-05-9	526	799	601	2.667	0,33	—
20.	351	3-Methyl-2-Heptanon	2.371-19-9	676	804	821	2.659	0,33	—
21.	360	2-Methyl-1-Penten	763-29-1	612	786	754	819	0,10	706
22.	364	2-Methyl-Furan	534-22-5	831	864	956	10.656	1,30	526
23.	373	3-Methyl-Furan	930-27-8	639	837	757	2.892	0,35	—
24.	379	Methylen-Cyclopentan	1.528-30-9	611	772	698	563	0,07	—
25.	384	?					1.178	0,14	—
26.	400	1,3-Cyclohexadien	592-57-4	746	864	773	313	0,04	—
27.	404	1,4-Cyclohexadien	628-41-1	882	962	900	6.492	0,79	—
28.	407	1-Methyl-1,3-Cyclopentadien	96-39-9	833	973	833	5.696	0,70	—
29.	423	Benzol	71-43-2	955	977	968	818.092	100	39
30.	427	Thiophen	110-02-1	771	974	780	59.083	7,22	901
31.	435	?					1.742	0,21	—
32.	451	Thio-Cyansäure-Methylester; Methyl-Thio-Cyanat	556-64-9	480	860	524	1.619	0,20	—
33.	460	2-Methyl-1-Penten-3-in	926-55-6	881	944	894	690	0,08	—
34.	467	2,4-Hexadienal	142-83-6	754	904	777	1.415	0,17	556
35.	474	2,5-Dimethyl-Furan	625-86-5	705	892	766	5.651	0,69	—
36.	487	2,4-Dimethyl-(1H-Pyrrol)	600-28-2	419	529	664	680	0,08	—
37.	491	Isothio-Cyansäure-Methylester; Methyl-Isothio-Cyanat	556-61-6	774	982	784	124.141	15,17	947
38.	504	1-Methyl-Pyrrol	96-54-8	845	924	896	17.848	2,18	—

Ifd. Nr.	t _R [sec]	Substanz	CARN	MS-Werte			Peak- fläche	rel.Fl. [%]	H.-Nr. [20]
				Pur	Fit	Rfit			
39.	519	Dimethyl-Disulfid	624-92-0				1.084	0,13	622
40.									
41.	536	1-Hepten-3-in	2.384-73-8	501	779	520	923	0,11	—
42.									
43.	547	3,4-Heptadien	2.454-31-1	596	868	622	855	0,10	—
44.	554	Toluol	108-88-3	905	960	923	313.787	38,36	193
45.	567	2-Methyl-Thiophen	554-14-3				7.632	0,93	—
46.	576	Tricyclo[4.1.0.0 ^{2,7}]-Heptan	287-13-8	682	879	703	1.612	0,20	—
47.	595	2,2-Dimethyl-4-Pental	5.497-67-6				2.197	0,27	—
48.	610	?					258	0,03	—
49.	616	3,4,4-Trimethyl-5-Oxo-2-Hexensäure	14.919-56-3	469	806	534	503	0,06	—
50.	633	Hexamethyl-Cyclotrisiloxan	541-05-9				2.553	0,31	—
51.									
52.	678	Ethyl-Benzol	100-41-4	907	977	915	22.845	2,79	11
53.	689	Ethynyl-Benzol	536-74-3	559	960	559	83.702	10,23	—
54.	710	Styrol	100-42-5	930	981	938	100.965	12,34	189
55.	717	<i>o</i> -Xylol	95-47-6	859	972	870	17.441	2,13	208a
56.	754	Cumol; Isopropyl-Benzol	98-82-8	646	863	703	577	0,07	66
57.	775	2-Propenyl-Benzol; Allyl-Benzol	300-57-2	639	903	664	780	0,10	—
58.	787	N-Benzyl-2-Amino-Ethanol	104-63-2	481	882	503	899	0,11	—
59.	795	Isocyano-Benzol	931-54-4				53.370	6,52	—
60.									
61.	813	1-Propenyl-Benzol; β -Methyl-Styrol	637-50-3				4.436	0,54	—
62.									
63.	827	Benzo-[<i>b</i>]-Furan	271-89-6				15.406	1,88	—
64.									
65.	858	?					1.238	0,15	—
66.	871	1,2-Divinyl-3-Methyl-Cyclobutan	22.704-00-3				847	0,10	—
67.	878	1-Propinyl-Benzol; 1-Phenyl-1-Propin	673-32-5				13.600	1,66	—
68.	886	Propadienyl-Benzol	2.327-99-3	499	860	530	1.077	0,13	—
69.	931	3-Phenyl-Acrolein	104-55-2	598	884	662	287	0,04	—
70.									
71.	1.007	Naphthalin	91-20-3	830	983	830	3.485	0,43	140
72.	1.038	?					134	0,02	—

Tabelle 38: Die Identifikationsvorschläge der NIST-Massenspektrenbibliothek für die auf W.3-Adsorptionsröhrchen angereicherten Rauchgasbestandteile von Tribunil

lfd. Nr.	t _R [sec]	Substanz	CARN	MS-Werte			Peak-fläche	rel.Fl. [%]	H.-Nr. [20]	Konz. [mg/m ³]
				Pur	Fit	Rfit				
1.	254	Methyl-Silan	992-94-9	778	810	932	126	0,12	—	0,22
2.	260	Luft					103.719	94,68	—	
3.	265	3-Butin-1-ol	927-74-2	578	614	753	1.068	0,97	—	1,89
4.	272	Isobuten	115-11-7	638	669	706	48.764	44,51	389	86,07
5.										
6.	278	?					3.052	2,79	—	5,39
7.	284	2-Penten	109-68-2	353	637	395	474	0,43	457a	0,84
8.	287	Propen	115-07-1				7.059	6,44	169	12,46
9.	292	O-Isobutyl-Hydroxyl-Amin	5.618-62-2				3.368	3,07	—	5,94
10.	297	Tetrahydro-3-Methylen-2,5-Furandion	2.170-03-8	635	903	646	1.265	1,15	—	2,23
11.	299	Furan	110-00-9	790	911	833	5.539	5,06	703	9,78
12.										
13.	306	3-Methyl-1-Butin	598-23-2	666	752	743	6.305	5,76	—	11,13
14.	313	4,5-Dihydro-3,5-Dimethyl- -(3H-Furan-2-on)	5.145-01-7	660	782	744	390	0,36	—	0,69
15.	321	Schwefel-Kohlenstoff; Kohlenstoff-Disulfid	75-15-0	811	863	894	56.546	51,62	181	99,80
16.	330	2-Butin	503-17-3				791	0,72	697	1,40
17.	334	trans-1,3-Pentadien	504-60-9	782	891	824	2.237	2,04	—	3,95
18.	341	Cyan-Essigsäure	372-09-8	265	793	287	509	0,46	344	0,90
19.	345	1,3-Cyclopentadien	542-92-7	471	594	511	845	0,77	—	1,49
20.	349	?					702	0,64	—	1,24
21.	359	?					228	0,21	—	0,40
22.	364	2-Methyl-Furan	534-22-5	659	864	753	1.959	1,79	526	3,46
23.	372	3-Methyl-Furan	930-27-8				583	0,53	—	1,03
24.	378	Methylen-Cyclobutan	1.120-56-5	501	766	549	364	0,33	—	0,64
25.	385	?					129	0,12	—	0,23
26.	398	?					275	0,25	—	0,49
27.	402	3-Hexen-1-in	17.669-38-4	702	909	727	968	0,88	—	1,71
28.	406	2-Hexen-4-in	14.092-20-7	672	854	733	629	0,57	—	1,11
29.	421	Benzol	71-43-2	946	971	961	109.548	100	39	193,35
30.	426	Thiophen	110-02-1	676	954	685	10.012	9,14	901	17,67
31.	440	3,5-Hexadien-2-ol	3.280-51-1	551	787	660	330	0,30	—	0,58
32.	450	Thio-Cyansäure-Methylester; Methyl-Thio-Cyanat	556-64-9	340	791	374	618	0,56	—	1,09
33.	463	2,3,3-Trimethyl-Cyclobutanon	28.290-01-9	469	876	490	551	0,50	—	0,97
34.										
35.	473	2,5-Dimethyl-Furan	625-86-5	786	900	838	1.282	1,17	—	2,26
36.	485	3-Methyl-2-Cyclopenten-1-on	2.758-18-1	684	772	799	328	0,30	—	0,58
37.	490	Isothio-Cyansäure-Methylester; Methyl-Isothio-Cyanat	556-61-6				1.079	0,98	947	1,90
38.	504	1-Methyl-Pyrrol	96-54-8	805	906	862	3.221	2,94	—	5,69

Tabelle 39: Die Identifikationsvorschläge der NIST-Massenspektrenbibliothek für die auf **Carbotrap-400**-Adsorptionsröhrchen angereicherten Rauchgasbestandteile von unbehandeltem **Fichtenholz**

lfd. Nr.	t _R [sec]	Substanz	CARN	MS-Werte			Peak-fläche	rel.Fl. [%]	H.-Nr. [20]
				Pur	Fit	Rfit			
1.	255	Methyl-Silan	992-94-9	761	799	922	666	0,67	—
2.	260	Luft					28.586	28,67	—
3.	272	1,3-Butadien	106-99-0	417	613	539	2.239	2,25	44
4.	279	?					146	0,15	—
5.	294	Isobutan	75-28-5	653	727	724	67	0,07	45
6.									
7.	300	Furan	110-00-9	416	892	438	91	0,09	703
8.	305	<i>trans</i> -1,3-Pentadien	504-60-9	373	750	436	60	0,06	—
9.									
10.	321	Schwefel-Kohlenstoff; Kohlenstoff-Disulfid	75-15-0				945	0,95	181
:									
15.	402	1,4-Cyclohexadien	628-41-1				110	0,11	—
16.	405	?					91	0,09	—
17.	421	Benzol	71-43-2	911	975	924	99.699	100	39
:									
20.	553	Toluol	108-88-3	854	955	868	33.645	33,75	193
21.	563	2-Methyl-Thiophen	554-14-3				109	0,11	—
22.	595	2,2-Dimethyl-4-Pentenal	5.497-67-6				61	0,06	—
23.	636	Hexamethyl-Cyclotrisiloxan	541-05-9	642	757	821	190	0,19	—
24.	678	Ethyl-Benzol	100-41-4	404	761	479	214	0,21	11
25.	689	Ethynyl-Benzol	536-74-3	697	955	713	2.198	2,20	—
26.	711	Styrol	100-42-5	915	978	926	2.244	2,25	189
27.	717	<i>o</i> -Xylol	95-47-6	917	951	944	1.762	1,77	208a
28.	777	Benz-Aldehyd	100-52-7				94	0,09	302
29.	797	Isocyano-Benzol	931-54-4				1.010	1,01	—
30.	830	Benzo-[<i>b</i>]-Furan	271-89-6				42	0,04	—
31.	879	1-Propinyl-Benzol; 1-Phenyl-1-Propin	673-32-5	356	761	402	185	0,19	—
32.	887	3-Isocyano-Toluol	20.600-54-8				38	0,04	—
33.	932	?					77	0,08	—
34.	1.008	Naphthalin	91-20-3	251	430	277	61	0,06	140

Tabelle 40: Die Identifikationsvorschläge der NIST-Massenspektrenbibliothek für die auf Tenax-TA-Adsorptionröhrchen angereicherten Rauchgasbestandteile von unbehandeltem Fichtenholz

lfd. Nr.	t _R [sec]	Substanz	CARN	MS-Werte			Peak-fläche	rel.Fl. [%]	H.-Nr. [20]
				Pur	Fit	Rfit			
1.									
2.	260	Luft					2.996	0,34	—
3.	273	1,3-Butadien	106-99-0	716	805	758	3.557	0,40	—
4.	279	1-Buten-3-in	689-97-4	792	936	823	818	0,09	44
5.	293	Isobutan	75-28-5	714	786	780	502	0,06	45
6.	296	Propen	115-07-1	579	808	625	339	0,04	169
7.	299	Furan	110-00-9	703	904	741	281	0,03	703
8.	305	3-Methyl-1-Butin	598-23-2	562	680	735	981	0,11	—
9.	314	4-Methyl-1-Pentin-3-on	13.531-82-3	453	773	562	344	0,04	—
10.	321	Schwefel-Kohlenstoff; Kohlenstoff-Disulfid	75-15-0				16.528	1,88	181
11.	344	1-Penten-3-in	646-05-9	617	763	754	372	0,04	—
12.	362	2-Methyl-Furan	534-22-5	784	864	895	731	0,08	526
13.	373	3-Methyl-Furan	930-27-8				304	0,03	—
14.	397	1,5-Hexadien-3-in	821-08-9	854	924	890	1.130	0,13	—
15.	401	1,4-Cyclohexadien	628-41-1	869	932	908	1.751	0,20	—
16.	405	1-Methyl-1,3-Cyclopentadien	96-39-9	817	956	822	1.469	0,17	—
17.	420	Benzol	71-43-2	943	981	954	879.289	100	39
18.	433	1,5-Hexadiin	628-16-0	731	868	784	1.105	0,13	—
19.	472	2,5-Dimethyl-Furan	625-86-5	358	791	429	173	0,02	—
20.	552	Toluol	108-88-3	916	963	932	564.996	64,26	193
21.	563	2-Methyl-Thiophen	554-14-3				1.003	0,11	—
22.	597	2,2-Dimethyl-4-Pentenal	5.497-67-6				236	0,03	—
23.									
24.	677	Ethyl-Benzol	100-41-4	903	955	928	2.355	0,27	11
25.	689	Ethinyl-Benzol	536-74-3	684	977	684	25.622	2,91	—
26.	709	Styrol	100-42-5	874	981	881	29.526	3,36	189
27.	716	<i>o</i> -Xylol	95-47-6	863	962	873	137.436	15,63	208a
28.	777	Benz-Aldehyd	100-52-7	801	913	857	701	0,08	302
29.	795	Isocyano-Benzol	931-54-4				25.288	2,88	—
30.	827	Benzo-[<i>b</i>]-Furan	271-89-6	562	884	574	2.743	0,31	—
31.	878	1-Propinyl-Benzol; 1-Phenyl-1-Propin	673-32-5	790	973	799	4.434	0,50	—
32.	886	3-Isocyano-Toluol	20.600-54-8	692	913	738	198	0,02	—
33.	932	?					89	0,01	—
34.	1.008	Naphthalin	91-20-3	498	913	516	897	0,10	140

Tabelle 41: Die Identifikationsvorschläge der NIST-Massenspektrenbibliothek für die auf W.3-Adsorptionsröhrchen angereicherten Rauchgasbestandteile von unbehandeltem Fichtenholz

lfd. Nr.	t _R [sec]	Substanz	CARN	MS-Werte			Peak-fläche	rel.Fl. [%]	H.-Nr. [20]	Konz. [mg/m ³]
				Pur	Fit	Rfit				
1.	254	Methyl-Silan	992-94-9	747	787	904	941	0,56	—	1,66
2.	260	Luft					7.061	4,21	—	
3.	272	1,3-Butadien	106-99-0	443	607	563	1.688	1,01	—	2,98
4.	279	Propen	115-07-1	301	791	347	118	0,07	169	0,21
5.	294	Isobutan	75-28-5	640	768	717	37	0,02	45	0,07
6.										
7.	299	Furan	110-00-9	615	891	642	54	0,03	703	0,10
8.	306	Spiropentan	157-40-4	518	755	624	60	0,04	—	0,11
9.										
10.	321	Schwefel-Kohlenstoff; Kohlenstoff-Disulfid	75-15-0				1.739	1,04	181	3,07
11.										
12.	363	2-Methyl-Furan	534-22-5				56	0,03	526	0,10
13.										
14.	398	?					161	0,10	—	0,28
15.	402	1,4-Cyclohexadien	628-41-1	692	834	806	246	0,15	—	0,43
16.	406	1,3-Cyclohexadien	592-57-4	575	803	652	170	0,10	—	0,30
17.	421	Benzol	71-43-2	932	974	945	167.618	100	39	295,85
18.	433	1,5-Hexadien-3-in	821-08-9	606	840	701	483	0,29	—	0,85
19.										
20.	553	Toluol	108-88-3	873	957	889	59.438	35,46	193	104,91
21.	563	2-Methyl-Thiophen	554-14-3				345	0,21	—	0,61
22.	597	2,2-Dimethyl-4-Pentalen	5.497-67-6				68	0,04	—	0,12
23.										
24.	678	Ethyl-Benzol	100-41-4	862	934	897	835	0,50	11	1,47
25.	689	Ethinyl-Benzol	536-74-3	729	982	729	10.025	5,98	—	17,69
26.	710	Styrol	100-42-5	892	983	899	10.913	6,51	189	19,26
27.	716	o-Xylol	95-47-6	799	902	811	2.222	1,33	208a	3,92
28.	778	Benz-Aldehyd	100-52-7				79	0,05	302	0,14
29.	796	Isocyano-Benzol	931-54-4				10.543	6,29	—	18,61
30.	828	Benzo-[b]-Furan	271-89-6	769	878	840	576	0,34	—	1,02
31.	878	1-Propinyl-Benzol; 1-Phenyl-1-Propin	673-32-5				1.363	0,81	—	2,41
32.										
33.	932	?					30	0,02	—	0,05
34.	1.009	Naphthalin	91-20-3	409	693	587	181	0,11	140	0,32

Tabelle 42: Die Zusammenstellung der Rauchgaskomponenten, die mit der GC/MS-Analytik bei Verbrennungs- und Löschversuchen mit Pflanzenschutzmitteln und bei früheren Versuchen mit Kunststoffen "detektiert" wurden

Tabellen-nummer	t _R	t _R ?	Substanz	CARN	*
32:	?	311	(1-Methyl-Butyl)-Acetat	626-38-0	
12:	?	367	(1-Methyl-Butyl)-Acetat	626-38-0	
21:	?	1.102	1-Ethyliden-(1 <i>H</i> -Inden)	2.471-83-2	
12:	?	1.118	1-Ethyliden-(1 <i>H</i> -Inden)	2.471-83-2	
20:	?	332	1,2-Heptadien	2.384-90-9	
21:	?	342	1,2-Heptadien	2.384-90-9	
31:	?	264	1,3-Butadiin	460-12-8	
19:	?	279	1,3-Butadiin	460-12-8	
17:	?	402	2-Methyl-1-Penten-3-in	926-55-6	
37:	?	460	2-Methyl-1-Penten-3-in	926-55-6	
16:	?	547	2-Methylen-4-Penten-Nitril	28.769-50-8	
15:	?	595	2-Methylen-4-Penten-Nitril	28.769-50-8	
26:	?	694	2,4-Dimethyl-Thiophen	638-00-6	
9:	?	725	2,4-Dimethyl-Thiophen	638-00-6	
38:	?	265	3-Butin-1-ol	927-74-2	
31:	?	501	3-Butin-1-ol	927-74-2	
15:	?	886	3-Methyl-Benzo-Nitril	620-22-4	
21:	?	904	3-Methyl-Benzo-Nitril	620-22-4	
19:	?	373	Azido-Benzol	622-37-7	
32:	?	781	Azido-Benzol	622-37-7	
38:	?	341	Cyan-Essigsäure	372-09-8	
30:	?	397	Cyan-Essigsäure	372-09-8	
20...22; 34; 36...38:	?	272	Isobuten	115-11-7	
9; 14; 15; 24...26; 30...32:	?	278	Isobuten	115-11-7	
37:	?	293	O-Isobutyl-Hydroxyl-Amin	5.618-62-2	
11:	?	609	O-Isobutyl-Hydroxyl-Amin	5.618-62-2	
18; 26:	?	809	Propadienyl-Benzol	2.327-99-3	
12; 37:	?	886	Propadienyl-Benzol	2.327-99-3	
16:	?	465	Pyrido-[2,3- <i>d</i>]-Pyridazin	253-73-6	
35:	?	484	Pyrido-[2,3- <i>d</i>]-Pyridazin	253-73-6	
40:	272	279	1,3-Butadien	106-99-0	
30; 32:	273	264	1-Buten-3-in	689-97-4	

Tabellen-nummer	t _R	t _R ?	Substanz	CARN	*
33:	273	506	1-Buten-3-in	689-97-4	
41:	286	279	Propen	115-07-1	
38:	286	292	Propen	115-07-1	
40:	286	296	Propen	115-07-1	
19:	303	314	2-Propen-Nitril	107-13-1	
36:	303	330	2-Propen-Nitril	107-13-1	
16:	313	345	4,5-Dihydro-3,5-Dimethyl-(3H-Furan-2-on)	5.145-01-7	
12:	333	293	<i>trans</i> -1,3-Pentadien	504-60-9	
29; 34; 35; 37; 39:	333	306	<i>trans</i> -1,3-Pentadien	504-60-9	
21:	333	345	<i>trans</i> -1,3-Pentadien	504-60-9	
39...41:	345	321	1,3-Cyclopentadien	542-92-7	
31:	345	546	1,3-Cyclopentadien	542-92-7	
33:	346	311	1-Propan-Sulfonyl-Chlorid	10.147-36-1	
21; 36:	388	349	Isobuten-Nitril	126-98-7	
32:	388	397	Isobuten-Nitril	126-98-7	
33:	389	305	2-Buten-Nitril	4.786-20-3	
10:	389	347	2-Buten-Nitril	4.786-20-3	
25:	389	517	2-Buten-Nitril	4.786-20-3	
16; 41:	398	430	1,5-Hexadien-3-in	821-08-9	
8:	398	440	1,5-Hexadien-3-in	821-08-9	
15; 26; 40:	398	433	1,5-Hexadiin	628-16-0	
24:	398	439	1,5-Hexadiin	628-16-0	
13; 14; 34:	402	407	1,4-Cyclohexadien	628-41-1	
22:	402	458	1,4-Cyclohexadien	628-41-1	
10:	403	361	2-Hexen-4-in	14.092-20-7	
20:	403	458	2-Hexen-4-in	14.092-20-7	
10:	404	537	1,2-bis-Methylen-Cyclobutan	14.296-80-1	
16:	405	460	1-Methyl-1,3-Cyclopentadien	96-39-9	
22; 38:	447	490	Thio-Cyansäure-Methylester; Methyl-Thio-Cyanat	556-64-9	
13:	492	346	Amino-Ameisensäure-Phenylester	622-46-8	
9:	493	680	<i>p</i> -Phenol-Sulfonsäure	98-67-9	
16:	502	366	2-Chlor-2-Propen-Nitril	920-37-6	
22:	506	538	2,4-Pentadien-Nitril	1.615-70-9	
18; 29:	546	264	3-Penten-1-in	2.206-23-7	
31:	546	510	3-Penten-1-in	2.206-23-7	

Tabellen-nummer	t _R	t _{R?}	Substanz	CARN	*
11:	597	519	1,5-Heptadien-3-in	3.511-27-1	
26:	597	533	2-Propenyliden-Cyclobuten	52.097-85-5	
38:	597	553	2-Propenyliden-Cyclobuten	52.097-85-5	
10:	665	495	2-Methyl-Pyridin	109-06-8	
9:	717	693	Nitro-Methyl-Benzol	622-42-4	
14:	717	814	Nitro-Methyl-Benzol	622-42-4	
21:	1.233	1.164	Acenaphten; 1,2-Dihydro-Acenaphthylen	83-32-9	
12:	1.233	1.212	Acenaphten; 1,2-Dihydro-Acenaphthylen	83-32-9	
			(1-Methylen-Propyl)-Benzol	2.039-93-2	*
			(2-Methyl-Butyl)-Cyclopentan	53.366-38-4	*
			(Methylen-Cyclopropyl)-Benzol	29.817-09-2	*
			α-Chlor-Styrol	618-34-8	*
			α-Methyl-Styrol; Isopropenyl-Benzol	98-83-9	*
			α-Toluol-Aldehyd; Phenyl-Ethanal	122-78-1	*
			β-Chlor-Styrol	622-25-3	*
			1-(2-Methyl-Cyclopropyl)-Ethanon	930-56-3	*
			1-(2-Methyl-Phenyl)-Ethanon	577-16-2	*
			1-(Vinyl-Oxy)-2,2,4-Trimethyl-Pentan	37.769-62-3	*
			1-Chlor-2-Phenyl-Ethanon	103-80-0	*
			1-Chlor-Naphthalin	25.586-43-0 auch: 90-13-1	*
			1-Ethyl-Naphthalin	1.127-76-0	*
			1-Fluor-Decan	334-56-5	*
			1-Hepten	592-76-7	*
			1-Heptyl-2-Methyl-Cyclopropan	74.663-91-5	*
			1-Hexadecen	629-73-2	*
			1-Hexin	693-02-7	*
			1-Methyl-Anthracen	610-48-0	*
			1-Methyl-Cyclohepten	1.453-25-4	*
			1-Methylen-(1H-Inden)	2.471-84-3	*
			1-Octen	111-66-0	*
			1-Pentadecen	13.360-61-7	*
			1-Penten	109-67-1	*
			1-Phenyl-1,2-Propandion	579-07-7	*
			1-Phenyl-Pyrrol	635-90-5	*
			1-Tridecen	2.437-56-1	*
			1-Undecen	821-95-4	*

Tabellennummer	t _R	t _{R?}	Substanz	CARN	*
			1-Vinyl-3-Methylen-Cyclopenten	61.142-07-2	*
			1,1-Dibrom-Ethan	557-91-5	*
			1,1-Dichlor-1-Propen	563-58-6	*
			1,1-Dichlor-Ethan	75-34-3	*
			1,1-Dichlor-Ethen	75-35-4	*
			1,1,1-Trichlor-Ethan	71-55-6	*
			1,1,1,2-Tetrachlor-Ethan	630-20-6	*
			1,1,2-Trichlor-Ethan	79-00-5	*
			1,1,2,2-Tetrachlor-Ethan	79-34-5	*
			1,2-Dibrom-3-Chlor-Propan	96-12-8	*
			1,2-Dichlor-Ethan	107-06-2	*
			1,2-Dichlor-Propan	78-87-5	*
			1,2-Dihydro-Naphthalin	447-53-0	*
			1,2,3-Trichlor-Benzol	87-61-6	*
			1,2,3-Trichlor-Propan	96-18-4	*
			1,2,3,4-Tetrachlor-Benzol	634-66-2	*
			1,2,3,5-Tetrachlor-Benzol	634-90-2	*
			1,2,4-Trichlor-Benzol	120-82-1	*
			1,2,4-Trimethyl-Benzol	95-63-6	*
			1,3-Dichlor-Propan	142-28-9	*
			1,3-Diethenyl-Benzol	108-57-6	*
			1,3-Diphenyl-Propan	1.081-75-0	*
			1,3-Thiazol	288-47-1	*
			1,3,5-Cyclooctatrien	1.871-52-9	*
			1,3,5-Trichlor-Benzol	108-70-3	*
			1,3,6-Trimethyl-Naphthalin	3.031-08-1	*
			1,4-Hexadien	592-45-0	*
			1,4-Pentadien	591-93-5	*
			1,5-Cyclooctadien	5.259-71-2	*
			1,5-Hexadien	592-42-7	*
			1 <i>H</i> -Inden	95-13-6	*
			1 <i>H</i> -Indol; 2,3-Benzo-Pyrrol	120-72-9	*
			2-(Methyl-Oxy)-Phenol	90-05-1	*
			2-(Propinyl-Oxy)-Benzol	13.610-02-1	*
			2-Acetyl-Furan; 1-(2-Furanyl)-Ethanon	1.192-62-7	*
			2-Brom-2-Methyl-Pentan	4.283-80-1	*
			2-Brom-Hexan	3.377-86-4	*

Tabellen-nummer	t _R	t _R ?	Substanz	CARN	*
			2-Buten	107-01-7	*
			2-Butenoyl-Chlorid; 1-Chlor-2-Butenal	10.487-71-5	*
			2-Chlor-Phenol	95-57-8	*
			2-Chlor-Toluol	95-49-8	*
			2-Cyclopenten-1-on	930-30-3	*
			2-Ethyl-1-Buten; 3-Methylen-Pentan	760-21-4	*
			2-Ethyl-Toluol	611-14-3	*
			2-Furan-Carbonsäure-Methylester	611-13-2	*
			2-Heptanon	110-43-0	*
			2-Hexanon	591-78-6	*
			2-Hexenal	505-57-7	*
			2-Methyl-Acrolein	78-85-3	*
			2-Methyl-Acrylsäure-Methylester	80-62-6	*
			2-Methyl-Biphenyl; 2-Phenyl-Toluol	643-58-3	*
			2-Methyl-Styrol	611-15-4	*
			2-Naphthalin-Aldehyd	66-99-9	*
			2-Naphthalin-Carbonitril	613-46-7	*
			2-Phenyl-Aziridin	1.499-00-9	*
			2-Phenyl-Naphthalin	621-94-2	*
			2,2-(Dimethyl-Oxy)-Propan	77-76-9	*
			2,2-Dichlor-Propan	594-20-7	*
			2,3-Dimethyl-Naphthalin	581-40-8	*
			2,3,3-Trimethyl-1-Buten	594-56-9	*
			2,3,4-Trimethyl-Hexan	921-47-1	*
			2,4-Dimethyl-2,3-Heptadien-5-in	41.898-89-9	*
			2,4-Dimethyl-Heptan	2.213-23-2	*
			2,5-bis[(Trimethyl-Silyl)-Oxy]-Benz-Aldehyd	56.114-69-3	*
			2,5-Dihydro-2,5-Dimethyl-Furan	59.242-27-2	*
			2,5-Dimethyl-2,4-Hexadien	764-13-6	*
			2,6-Dimethyl-Heptan	1.072-05-5	*
			3-(Methyl-Oxy)-Pentan	36.839-67-5	*
			3-Amino-Pyridin	462-08-8	*
			3-Chlor-1-Phenyl-1-Propanon	936-59-4	*
			3-Chlor-Anilin	108-42-9	*
			3-Cyano-Toluol	620-22-4	*
			3-Hexen-2-on	763-93-9	*
			3-Hexin	928-49-4	*

Tabellen-nummer	t _R	t _R ?	Substanz	CARN	*
			3-Hydroxy-Benz-Aldehyd; <i>m</i> -Formyl-Phenol	100-83-4	*
			3-Methyl-(<i>1H</i> -Pyrazol)	1.453-58-3	*
			3-Methyl-2-Butanon	563-80-4	*
			3-Methyl-Styrol	100-80-1	*
			3,3-Dimethyl-1-Hexen	3.404-77-1	*
			3,3-Dimethyl-1-Octen	74.511-51-6	*
			3,3-Dimethyl-Cyclobutanon	1.192-33-2	*
			3,3,5-Trimethyl-Cyclohexanol	116-02-9	*
			3,4-Dimethyl-Phenol	95-65-8	*
			3,4-Nonadien	37.050-03-6	*
			3,4-Pentadienal	4.009-55-6	*
			3,6,6-Trimethyl-Bicyclo[3.1.1]-Hept-2-en	4.889-83-2	*
			4-Chlor-1-Phenyl-Pyrazol	6.831-92-1	*
			4-Ethyl-Toluol	622-96-8	*
			4-Methyl-2-Heptanon	6.137-06-0	*
			4-Methyl-2-Pentanon	108-10-1	*
			4-Methyl-3-Penten-2-on	141-79-7	*
			4-Methyl-Octan	2.216-34-4	*
			4-Methyl-Styrol	622-97-9	*
			4-Phenyl-Butyro-Nitril	2.046-18-6	*
			4-Vinyl-Anisol; 4-(Methyl-Oxy)-Styrol	637-69-4	*
			4,5-Dihydro-Pyren	6.628-98-4	*
			4,5-Dimethyl-1-Hexen	16.106-59-5	*
			4,5-Dimethyl-Nonan	17.302-23-7	*
			4,5-Methylen-Phenanthren; Cyclopentan-[<i>def</i>]-Phenanthren	203-64-5	*
			5-Methyl-1-Hepten	13.151-04-7	*
			5-Methyl-1-Hexen	3.524-73-0	*
			5-Methyl-Furfural	620-02-0	*
			6-Chlor-Tetrazolo-[1,5- <i>b</i>]-Pyridazin	21.413-15-0	*
			6-Methyl-(<i>2H</i> -Pyridazin-3-on)	13.327-27-0	*
			6-Methyl-1-Hepten	5.026-76-6	*
			9-Fluorenon	486-25-9	*
			9-Methyl-Fluoren	1.430-97-3	*
			Acenaphthylen	208-96-8	*
			Aceto-Phenon; Phenyl-Ethanon	98-86-2	*
			Aceton; 2-Propanon	67-64-1	*

Tabellennummer	t _R	t _R ?	Substanz	CARN	*
			Anilin	62-53-3	*
			Anisol; (Methyl-Oxy)-Benzol	100-66-3	*
			Anthracen	120-12-7	*
			Benz-Aldehyd-Oxim	622-32-2	*
			Benzo-Phenon; Diphenyl-Keton	119-61-9	*
			Benzol-Methanol	100-51-6	*
			Benzoyl-Cyanid	613-90-1	*
			Biphenyl	92-52-4	*
			Brom-Benzol	108-86-1	*
			Brom-Chlor-Methan	74-97-5	*
			Brom-Dichlor-Methan	75-27-4	*
			Brom-Methan	74-83-9	*
			Bromoform; Tribrom-Methan	75-25-2	*
			Buttersäure-Methylester	623-42-7	*
			Butyl-Cyclopropan	930-57-4	*
			Chlor-Acetyl-Chlorid	79-04-9	*
			Chlor-Fluor-Methan	593-70-4	*
			Chlor-Methan	74-87-3	*
			Chloroform; Trichlor-Methan	67-66-3	*
			<i>cis</i> -1,2-Dichlor-Ethen	156-59-2	*
			<i>cis</i> -1,3-Dichlor-Propen	10.061-01-5	*
			<i>cis</i> -3-Hexen	7.642-09-3	*
			<i>cis</i> -4-Octen	7.642-15-1	*
			<i>cis</i> -7-Methyl-2-Decen	74.630-23-2	*
			Cyclohexan	110-82-7	*
			Cyclooctan	292-64-8	*
			Cyclopentan	287-92-3	*
			Cyclopentanon	120-92-3	*
			Cyclopenten	142-29-0	*
			Cyclopropan-[a]-Indan; 1,1a,6,6a-Tetrahydro-Cyclopropen-[a]-Inden	15.677-15-3	*
			Cyclopropyl-Aceton	4.160-75-2	*
			Decan	124-18-5	*
			Decen	—	*
			Diaceton; 4-Hydroxy-4-Methyl-2-Pentanon	123-42-2	*
			Dibenzo-Furan	132-64-9	*
			Dibrom-Chlor-Methan	124-48-1	*

Tabellen-nummer	t _R	t _R ?	Substanz	CARN	*
			Dibrom-Methan	74-95-3	*
			Dichlor-Difluor-Methan	75-71-8	*
			Dichlor-Methan	75-09-2	*
			Dimethyl-Cyclohexan	—	*
			Dimethyl-Trisulfid	3.658-80-8	*
			Diphenyl-Methan	101-81-5	*
			Dodecan	112-40-3	*
			Essigsäure	64-19-7	*
			Essigsäure-Anhydrid	108-24-7	*
			Ethyl-Cyclopropan	1.191-96-4	*
			Fluoren	86-73-7	*
			Furfural; 2-Furan-Aldehyd	98-01-1	*
			Heptadecan	629-78-7	*
			Heptadecen	—	*
			Heptan	142-82-5	*
			Heptanal	111-71-7	*
			Hexachlor-1,3-Butadien	87-68-3	*
			Hexadecan	544-76-3	*
			Hexan	110-54-3	*
			Indan; 2,3-Dihydro-Inden	496-11-7	*
			Isobutanal	78-84-2	*
			<i>m</i> -Dichlor-Benzol	541-73-1	*
			<i>m</i> -Xylol	108-38-3	*
			Mesitylen; 1,3,5-Trimethyl-Benzol	108-67-8	*
			Methan-Thiol	74-93-1	*
			Methyl-Cyclohexan	108-87-2	*
			N-Methyl-Anilin	100-61-8	*
			Nitro-Cyclohexan	1.122-60-7	*
			Nonan	111-84-2	*
			Nonanal	124-19-6	*
			Nonen	—	*
			O-(3-Methyl-Butyl)-Hydroxyl-Amin	19.411-65-5	*
			<i>o</i> -Cresol; 2-Methyl-Phenol	95-48-7	*
			<i>o</i> -Dichlor-Benzol	95-50-1	*
			Octadecan	593-45-3	*
			Octan	111-65-9	*

Tabellen-nummer	t _R	t _R ?	Substanz	CARN	*
			Oxonan; Oxa-Cyclononan	6.573-50-8	*
			<i>p</i> -Toluol-Aldehyd	104-87-0	*
			<i>p</i> -Xylol	106-42-3	*
			Pentadecan	629-62-9	*
			Pentanal	110-62-3	*
			Phenanthren	85-01-8	*
			Phenol	108-95-2	*
			Phthalsäure-Anhydrid	85-44-9	*
			Propyl-Benzol; 1-Phenyl-Propan	103-65-1	*
			Pyren	129-00-0	*
			Pyridin	110-86-1	*
			<i>tert.</i> -Butyl-Hydro-Peroxid	75-91-2	*
			<i>tert.</i> -Butyl-Benzol	98-06-6	*
			Tetrachlor-Ethen	127-18-4	*
			Tetrachlor-Methan	56-23-5	*
			Tetradecan	629-59-4	*
			Tetradecen	—	*
			Thio-bis-Benzol; Diphenyl-Sulfid	139-66-2	*
			<i>trans</i> -1,2-Dichlor-Ethen	156-60-5	*
			<i>trans</i> -1,3-Dichlor-Propen	10.061-02-6	*
			<i>trans</i> -2-Decenal	3.913-81-3	*
			<i>trans</i> -3-Hexen	13.269-52-8	*
			<i>trans</i> -3-Nonene-1-ol	10.339-61-4	*
			<i>trans</i> -3-Undecen	1.002-68-2	*
			<i>trans</i> -4-Dodecen	7.206-15-7	*
			<i>trans</i> -Crotonsäure-Methylester	623-43-8	*
			<i>trans</i> -Stilben; 1,2-Diphenyl-Ethylen	588-59-0	*
			Trichlor-Ethen	79-01-6	*
			Tridecan	629-50-5	*
			Undecan	1.120-21-4	*
			Vinyl-Styrol; Diethenyl-Benzol	1.321-74-0	*
			Xanthen; Dibenzo- γ -Pyran	92-83-1	*
	252		N-Methyl-1,2-Diamino-Ethan	109-81-9	*
	253		Aziridin	151-56-4	*
	254		Dimethyl-Amin	124-40-3	*
	254		Methyl-Silan	992-94-9	*

Tabellen-nummer	t _R	t _{R?}	Substanz	CARN	*
	272		1,2-Butadien	590-19-2	*
	272		1,3-Butadien	106-99-0	*
	272		2,5-Dihydro-Thiophen-1,1-Dioxid	77-79-2	*
	273		1-Buten-3-in	689-97-4	*
	275		2-Pentin-1-ol	6.261-22-9	*
	284		2-Penten	109-68-2	*
	286		Propen	115-07-1	*
	289		Isocyano-Methan	593-75-9	*
	292		2-Methyl-1-Nitro-Propan	625-74-1	*
	293		4-Methyl-3-Pentensäure	504-85-8	*
	293		Isobutan	75-28-5	*
	296		2,5-Dihydro-(1H-Pyrrol)	109-96-6	*
	298		Tetrahydro-3-Methylen-2,5-Furandion	2.170-03-8	*
	299		3-Methyl-2,5-Furandion	616-02-4	*
	299		Furan	110-00-9	*
	303		2-Propen-Nitril	107-13-1	*
	304		3-Methyl-1,2-Butadien	598-25-4	*
	305		3-(Ethyl-Oxy)-6-Methyl-Pyridin-2-Thion	40.585-12-4	*
	305		3-Methyl-1-Butin	598-23-2	*
	306		cis-1,3-Pentadien	1.574-41-0	*
	306		Spiropentan	157-40-4	*
	310		8-Methyl-Tetrazolo-[1,5-b]-Pyridazin	28.593-27-3	*
	310		Essigsäure-Methylester	79-20-9	*
	312		3-Methyl-2-Methylen-Butan-Nitril	2.813-69-6	*
	313		4,5-Dihydro-3,5-Dimethyl-(3H-Furan-2-on)	5.145-01-7	*
	314		4-Methyl-1-Pentin-3-on	13.531-82-3	*
	321		Schwefel-Kohlenstoff; Kohlenstoff-Disulfid	75-15-0	*
	329		2-Butin	503-17-3	*
	330		1,4-Butan-Dinitril	110-61-2	*
	333		2-Cyano-Acet-Amid	107-91-5	*
	333		3-Methyl-1,4-Pentadien	1.115-08-8	*
	333		trans-1,3-Pentadien	504-60-9	*
	341		Thio-Harnstoff	62-56-6	*
	342		1-Propan-Thiol	107-03-9	*
	344		1-Penten-3-in	646-05-9	*
	344		Cyclobutanol	2.919-23-5	*

Tabellen-nummer	t _R	t _R ?	Substanz	CARN	*
	344		N-Methyl-3-Amino-Propan-Nitril	693-05-0	*
	345		1,3-Cyclopentadien	542-92-7	*
	345		2-Chlor-3-Methyl-Butan	631-65-2	*
	346		1-Propan-Sulfonyl-Chlorid	10.147-36-1	*
	348		3-Hexen-1-ol-Acetat	3.681-71-8	*
	349		2-Ethyl-Butanal	97-96-1	*
	349		4-Methyl-1-Pentin	7.154-75-8	*
	351		3-Methyl-2-Heptanon	2.371-19-9	*
	358		1-Hexen	592-41-6	*
	358		4-Methyl-1-Penten	691-37-2	*
	358		4,4-Dimethyl-2-Oxetanon	1.823-52-5	*
	358		Propyl-Cyclopropan	2.415-72-7	*
	358		Tetrahydro-3,6-Dimethyl-Pyran-2-on	3.720-22-7	*
	360		2-Methyl-1-Penten	763-29-1	*
	363		2-Methyl-Furan	534-22-5	*
	367		4-Acetyl-Oxy-2-Butanon	10.150-87-5	*
	372		3-Methyl-Furan	930-27-8	*
	372		<i>cis</i> -3-Cyclopenten-1,2-diol	694-29-1	*
	379		Methylen-Cyclopentan	1.528-30-9	*
	380		(1-Methyl-Ethyliden)-Cyclopropan	4.741-86-0	*
	380		Methylen-Cyclobutan	1.120-56-5	*
	382		1,1-Dimethyl-2-Methylen-Cyclopropan	4.372-94-5	*
	382		3,3-Dimethyl-Cyclobuten	16.327-38-1	*
	383		Isopropenyl-Cyclopropan	4.663-22-3	*
	386		1,5-Heptadien-3,4-diol	51.945-98-3	*
	386		N-Butyliden-Ethan-Amin	1.611-12-7	*
	388		Isobuten-Nitril	126-98-7	*
	389		2-Buten-Nitril	4.786-20-3	*
	390		3-Buten-Nitril	109-75-1	*
	398		1,5-Hexadien-3-in	821-08-9	*
	398		1,5-Hexadiin	628-16-0	*
	400		2,4-Hexadiin	2.809-69-0	*
	402		1,4-Cyclohexadien	628-41-1	*
	403		1,3-Cyclohexadien	592-57-4	*
	403		2-Hexen-4-in	14.092-20-7	*
	404		1,2-bis-Methylen-Cyclobutan	14.296-80-1	*
	404		3-Hexen-1-in	17.669-38-4	*

Tabellennummer	t _R	t _{R?}	Substanz	CARN	*
	404		5-Methyl-1,3-Cyclopentadien	96-38-8	*
	404		Chlor-Aceto-Nitril	107-14-2	*
	405		1-Methyl-1,3-Cyclopentadien	96-39-9	*
	405		5-Methyl-1,3-Cyclopentadien	26.519-91-5	*
	406		2-Cyclopenten-1-Propanal	64.504-73-0	*
	421		Benzol	71-43-2	*
	426		Thiophen	110-02-1	*
	432		1,3-bis-Methylen-Cyclohexan	52.086-82-5	*
	432		Isobuten-Dinitril	922-64-5	*
	440		3,5-Hexadien-2-ol	3.280-51-1	*
	447		Thio-Cyansäure-Methylester; Methyl-Thio-Cyanat	556-64-9	*
	462		2,3,3-Trimethyl-Cyclobutanon	28.290-01-9	*
	462		3,3,5-Trimethyl-Hexen	13.427-43-5	*
	462		<i>trans</i> -1,3-Dimethyl-Cyclopentan	1.759-58-6	*
	463		1-(Methyl-Oxy)-2-Methyl-Butan	62.016-48-2	*
	464		2,4-Dimethyl-1,3-Pentadien	1.000-86-8	*
	464		Isobutensäure-2-Propenylester	96-05-9	*
	465		2-Ethyl-Furan	3.208-16-0	*
	466		<i>trans</i> -1-Propenyl-Oxy-Prop-2-en	61.142-13-0	*
	467		2,4-Hexadienal	142-83-6	*
	472		2,5-Dimethyl-Furan	625-86-5	*
	478		3-Pyridin-Carbonitril	100-54-9	*
	482		1,2-Thiazol	288-16-4	*
	482		2,3-Dimethyl-2-Nitro-Butan	34.075-28-0	*
	484		2-Vinyl-2-Butenal	20.521-42-0	*
	485		3-Methyl-2-Cyclopenten-1-on	2.758-18-1	*
	487		2,4-Dimethyl-(<i>1H</i> -Pyrrol)	600-28-2	*
	491		Isothio-Cyansäure-Methylester; Methyl-Isothio-Cyanat	556-61-6	*
	492		Amino-Ameisensäure-Phenylester	622-46-8	*
	493		<i>p</i> -Phenol-Sulfonsäure	98-67-9	*
	494		4-Methyl-Pyridin	108-89-4	*
	502		2-Chlor-2-Propen-Nitril	920-37-6	*
	504		1-Methyl-Pyrrol	96-54-8	*
	506		2,4-Pentadien-Nitril	1.615-70-9	*
	506		Bis(Pyridin-2-yl)-Methanol	35.047-29-1	*
	515		Dimethyl-Disulfid	624-92-0	*

Tabellen-nummer	t _R	t _R ?	Substanz	CARN	*
	518		Spiro[3.3]-Hepta-1,5-dien	22.635-78-5	*
	524		2-Methyl-1-Hexen-3-in	23.056-94-2	*
	525		2-Butin-Dinitril	1.071-98-3	*
	535		1-Methyl-1,4-Cyclohexadien	4.313-57-9	*
	535		N,N-Dimethyl-1,2-Diamino-Ethan	110-70-3	*
	536		1-Hepten-3-in	2.384-73-8	*
	546		3-Penten-1-in	2.206-23-7	*
	547		3,4-Heptadien	2.454-31-1	*
	553		Toluol	108-88-3	*
	565		3-Methyl-Thiophen	616-44-4	*
	566		2-Methyl-Thiophen	554-14-3	*
	573		2-Furan-Carbonitril	617-90-3	*
	576		Tricyclo[4.1.0.0 ^{2,7}]-Heptan	287-13-8	*
	582		Hexanal	66-25-1	*
	594		2,2-Dimethyl-4-Pentenal	5.497-67-6	*
	594		4-Methyl-Cycloheptanon	13.609-59-1	*
	594		Tetramethyl-Methylen-Cyclopropan	54.376-39-5	*
	595		2-Methyl-2-Oxiranyl-Cyclobutanon	75.314-19-1	*
	597		1-Chlor-Heptan	629-06-1	*
	597		1,5-Heptadien-3-in	3.511-27-1	*
	597		2-Propenyliden-Cyclobuten	52.097-85-5	*
	598		1-Chlor-1-Methyl-Cyclopropan	50.915-28-1	*
	602		1,8-Nonadiin	2.396-65-8	*
	609		2,3,5-Trimethyl-Hexan	1.069-53-0	*
	609		8-Hexyl-Hydroxyl-Amin	4.665-68-3	*
	610		Essigsäure-Butylester	123-86-4	*
	615		1-Isobutanol	78-83-1	*
	616		3,4,4-Trimethyl-5-Oxo-2-Hexensäure	14.919-56-3	*
	616		Cyclohexan-Ethanol-Acetat	21.722-83-8	*
	631		<i>m</i> -Cresol; 3-Methyl-Phenol	108-39-4	*
	633		Tricyclo[3.2.1.0 ^{1,5}]-Octan	19.074-25-0	*
	636		Hexamethyl-Cyclotrisiloxan	541-05-9	*
	654		Chlor-Benzol	108-90-7	*
	663		2-Chlor-Thiophen	96-43-5	*
	665		2-Methyl-Pyridin	109-06-8	*
	677		Ethyl-Benzol	100-41-4	*
	688		Ethinyl-Benzol	536-74-3	*

Tabellennummer	t _R	t _R ?	Substanz	CARN	*
	710		Styrol	100-42-5	*
	716		<i>o</i> -Xylol	95-47-6	*
	717		Nitro-Methyl-Benzol	622-42-4	*
	717		Thio-Phenol; Phenyl-Mercaptan	108-98-5	*
	754		1,2,2-Trimethyl-3-Butenyl-Benzol	61.142-17-4	*
	754		Cumol; Isopropyl-Benzol	98-82-8	*
	775		2-Propenyl-Benzol; Allyl-Benzol	300-57-2	*
	775		Cyclopropyl-Benzol	873-49-4	*
	777		Benz-Aldehyd	100-52-7	*
	783		2-Chlor-1-Phenyl-Ethanon	532-27-4	*
	783		Harnstoff	2.048-50-2	*
	784		2-Hydroxy-Benzo-Nitril	611-20-1	*
	784		3-Chlor-Toluol	108-41-8	*
	786		4-Chlor-Toluol	106-43-4	*
	787		N-Benzyl-2-Amino-Ethanol	104-63-2	*
	787		<i>trans</i> -2-Hydroxy-Zimtsäure; <i>o</i> -Cumarsäure	614-60-8	*
	796		Isocyano-Benzol	931-54-4	*
	802		Cyano-Benzol; Benzo-Nitril	100-47-0	*
	809		4-Ethynyl-Toluol	766-97-2	*
	811		3-Methyl-Thiazolidin	52.288-89-8	*
	812		1-Propenyl-Benzol; β -Methyl-Styrol	637-50-3	*
	821		1-Chlor-Vinyl-Sulfonyl-Benzol	5.535-51-3	*
	827		Benzo-[<i>b</i>]-Furan	271-89-6	*
	835		1,1,3,3,5,5-Hexamethyl-Trisiloxan	1.189-93-1	*
	839		<i>p</i> -Dichlor-Benzol	106-46-7	*
	857		5-Methyl-2-Amino-Hexan	28.292-43-5	*
	858		1-(3,4-Dimethyl-Phenyl)-2-Amino-Propan	102-31-8	*
	858		1,2,3-Trimethyl-Benzol	526-73-8	*
	858		1,3-bis-Benzol-2-Vinyl-Propan	61.141-97-7	*
	858		7-Ethyl-1,3,5-Cycloheptatrien	17.634-51-4	*
	858		Benzol-Hexan-Amin	17.734-20-2	*
	868		Limonen	138-86-3	*
	869		6-Noninsäure	56.630-31-0	*
	870		1,2-Divinyl-3-Methyl-Cyclobutan	22.704-00-3	*
	870		4-Methylen-6-Hepten-2-ol	42.201-30-9	*
	878		1-Propinyl-Benzol; 1-Phenyl-1-Propin	673-32-5	*

Tabellen-nummer	t _R	t _{R?}	Substanz	CARN	*
	885		2,4,6-Cycloheptatrien-1-Carbonitril	13.612-59-4	*
	885		4-Cyano-Toluol	104-85-8	*
	886		3-Isocyano-Toluol	20.600-54-8	*
	891		α -(Methyl-Oxy)-Phenyl-(Methyl-Acetat)	56.143-21-6	*
	892		1-(Methyl-Oxy)-4-(2-Phenyl-Ethyl)-Benzol	10.310-21-5	*
	904		Phenyl-Aceto-Nitril; Benzyl-Cyanid	140-29-4	*
	905		4-Isocyano-Toluol	7.175-47-5	*
	929		3-Phenyl-Acrolein	104-55-2	*
	932		7-Methyl-Benzo-[b]-Furan	17.059-52-8	*
	933		2-Methyl-Benzo-[b]-Furan	4.265-25-2	*
	975		1-Butinyl-Benzol	622-76-4	*
	976		1-Methyl-(1 <i>H</i> -Inden)	767-59-9	*
	976		1-Methyl-2-Cyclopropen-1-yl-Benzol	65.051-83-4	*
	982		(1-Methylen-2-Propenyl)-Benzol	2.288-18-8	*
	991		Chinolin; Benzo-[b]-Pyridin	91-22-5	*
	991		Isochinolin; Benzo-[c]-Pyridin	119-65-3	*
	1.008		Naphthalin	91-20-3	*
	1.013		5-Phenyl-1,3-Thiazol	1.826-13-7	*
	1.013		Benzo-Thiophen	95-15-8	*
	1.033		Benzo-1,2-Thiazol	272-16-2	*
	1.035		Benzo-1,3-Thiazol	95-16-9	*
	1.036		Benzo-1,2-Thiazol-3-Carbonsäure	40.991-34-2	*
	1.101		1,4-Dihydro-1,4-Methano-Naphthalin	4.453-90-1	*
	1.115		1-Methyl-Naphthalin	90-12-0	*
	1.164		2-Vinyl-Naphthalin	827-54-3	*
	1.233		Acenaphten; 1,2-Dihydro-Acenaphthylen	83-32-9	*
	1.236		Biphenylen	259-79-0	*

Tabelle 43: Die Konzentrationen einiger Rauchgasbestandteile von Holzbränden verglichen mit jenen von Pyramin WG-Bränden

t_R [sec]	Substanz "i"	c_i [mg/m ³]	
		Holz	Pyramin WG
272	1,3-Butadien	2,98	100,98
299	Furan	0,10	21,32
421	Benzol	295,85	29.655,58
553	Toluol	104,91	636,73
677	Ethyl-Benzol	1,47	22,79
688	Ethynyl-Benzol	17,69	169,49
710	Styrol	19,26	254,88
716	<i>o</i> -Xylol	3,92	18,57
796	Isocyano-Benzol	18,61	85,48
1008	Naphthalin	0,32	5,48