

UMWELT & GESUNDHEIT

04/2023

Bestimmung von Geruchswahrnehmungsschwellen für Innenraumschadstoffe

Abschlussbericht

UMWELT & GESUNDHEIT 04/2023

Ressortforschungsplan des Bundesministerium für
Umwelt, Naturschutz und nukleare Sicherheit

Forschungskennzahl 3717 61 250 0
FB000303

Bestimmung von Geruchswahrnehmungsschwellen für Innenraumschadstoffe

Abschlussbericht

von

Dr.-Ing. Laura Brosig, Dipl.-Ing. Björn Maxeiner
Olfasense GmbH, Kiel

Im Auftrag des Umweltbundesamtes

Impressum

Herausgeber

Umweltbundesamt
Wörlitzer Platz 1
06844 Dessau-Roßlau
Tel: +49 340-2103-0
Fax: +49 340-2103-2285
buergerservice@uba.de
Internet: www.umweltbundesamt.de

 [umweltbundesamt.de](https://www.facebook.com/umweltbundesamt.de)

 [umweltbundesamt](https://twitter.com/umweltbundesamt)

Durchführung der Studie:

Olfasense GmbH
Fraunhofer Straße 13
24118 Kiel

Abschlussdatum:

Februar 2020

Redaktion:

Fachgebiet II 1.2 Toxikologie, gesundheitsbezogene Umweltbeobachtung
Malgorzata Debiak

Publikationen als pdf:

<http://www.umweltbundesamt.de/publikationen>

ISSN 1868-4340

Dessau-Roßlau, Juli 2023

Die Verantwortung für den Inhalt dieser Veröffentlichung liegt bei den Autorinnen und Autoren.

Kurzbeschreibung: Bestimmung von Geruchswahrnehmungsschwellen für Innenraumschadstoffe

Im Rahmen der Arbeiten des Ausschusses für Innenraumrichtwerte (AIR) wurde das Geruchsleitwert-Konzept entwickelt. Um die wissenschaftliche Grundlage für dieses Konzept zu stärken, wurden im Projekt „Bestimmung von Geruchswahrnehmungsschwellen für Innenraumschadstoffe“ die Geruchswahrnehmungsschwellen, Intensitäten und die hedonischen Empfindung 20 typischer Innenraumschadstoffe ermittelt.

Die Ermittlung der Geruchswahrnehmungsschwellen wurde gemäß der DIN EN 13725 und die Bestimmung der Intensitäten mit den daraus resultierenden Weber-Fechner-Koeffizienten entsprechend VDI 3882-1 durchgeführt. Mithilfe von Polaritätenprofilen wurde nach VDI 3940-4 die hedonische Wirkung dieser 20 Einzelsubstanzen und deren Ähnlichkeit oder Unähnlichkeit zu den Konzepten „Duft“ und „Gestank“ ermittelt.

Abstract: Determination of odour detection thresholds for indoor pollutants

The odour conductance concept was developed as part of the work of the German Committee on Indoor Guide Values. In order to support the scientific bases of this concept, the project "Determination of Odour Perception Thresholds for Indoor Pollutants" investigated the odour perception thresholds, intensities and hedonic odour tone of 20 typical indoor pollutants.

The determination of the odour detection thresholds was conducted according to DIN EN 13725 and the determination of the intensities and the resulting Weber-Fechner coefficients was carried out according to the VDI 3882-1. Using polarity profiles, the hedonic odour tone of these 20 individual substances and their similarities or dissimilarities to the concepts "fragrance" and "stench" were determined according to VDI 3940-4.

Inhaltsverzeichnis

Abbildungsverzeichnis.....	12
Tabellenverzeichnis	14
Abkürzungsverzeichnis.....	20
Zusammenfassung.....	21
Summary	24
1 Hintergrund und Problemstellung.....	27
2 Ziel und Gegenstand des Forschungsvorhabens.....	28
3 Grundlagen.....	29
3.1 Prüf- und Messverfahren	29
3.1.1 Bestimmung der Geruchsstoffkonzentration / der Geruchsschwelle eines Geruchsstoffes in Anlehnung an DIN EN 13725	29
3.1.2 Bestimmung der Geruchsintensität eines Geruchsstoffes und des Weber-Fechner- Koeffizienten (k_w) gemäß VDI 3882 Blatt 1	32
3.1.3 Bestimmung der hedonischen Geruchswirkung in Anlehnung an VDI 3940 Blatt 4	33
3.1.4 Qualitative und quantitative Bestimmung der Substanzkonzentrationen mittels FID, GC-MS und GC-IMS.....	34
3.1.4.1 FID	34
3.1.4.2 GC-MS	35
3.1.4.3 GC-IMS	35
3.2 Praxisanwendung.....	37
3.2.1 Probenaufbereitung und Konzentrationsberechnung.....	37
3.2.2 Prüferkollektiv, Prüfereignung und Messort	40
3.2.3 Konzentrationsbestimmung mittels FID, GC-MS und GC-IMS	40
3.2.3.1 FID	40
3.2.3.2 GC-MS	40
3.2.3.3 GC-IMS	43
3.2.4 Erfassung und Auswertung der Geruchsbewertungen mit trainierten Prüfern	43
3.2.4.1 Allgemeiner Ablauf	43
3.2.4.2 Geruchsstoffkonzentrationen/Geruchsschwellen.....	44
3.2.4.3 Intensitäten.....	46
3.2.4.4 Hedonik.....	46
4 Olfaktometrie	47
4.1 Allgemeines.....	47

4.2	Aceton	48
4.2.1	Probenaufbereitung.....	48
4.2.2	Beschreibung des Prüferkollektivs.....	48
4.2.3	Geruchsstoffkonzentration	49
4.2.4	Intensitäten und Weber-Fechner-Koeffizient.....	51
4.2.5	Hedonische Geruchswirkung	53
4.2.6	Geruchscharakter.....	53
4.3	2-Ethylhexanol	54
4.3.1	Probenaufbereitung.....	54
4.3.2	Beschreibung des Prüferkollektivs.....	54
4.3.3	Geruchsstoffkonzentration	55
4.3.4	Intensitäten und Weber-Fechner-Koeffizient.....	57
4.3.5	Hedonische Geruchswirkung	59
4.3.6	Geruchscharakter.....	59
4.4	Acetophenon.....	60
4.4.1	Probenaufbereitung.....	60
4.4.2	Beschreibung des Prüferkollektivs.....	60
4.4.3	Geruchsstoffkonzentration	61
4.4.4	Intensitäten und Weber-Fechner-Koeffizient.....	63
4.4.5	Hedonische Geruchswirkung	65
4.4.6	Geruchscharakter.....	65
4.5	Benzothiazol.....	66
4.5.1	Probenaufbereitung.....	66
4.5.2	Beschreibung des Prüferkollektivs.....	66
4.5.3	Geruchsstoffkonzentration	67
4.5.4	Intensitäten und Weber-Fechner-Koeffizient.....	69
4.5.5	Hedonische Geruchswirkung	71
4.5.6	Geruchscharakter.....	71
4.6	2-Phenoxyethanol	72
4.6.1	Probenaufbereitung.....	72
4.6.2	Beschreibung des Prüferkollektivs.....	72
4.6.3	Geruchsstoffkonzentration	73
4.6.4	Intensitäten und Weber-Fechner-Koeffizient.....	75
4.6.5	Hedonische Geruchswirkung	77

4.6.6	Geruchscharakter.....	77
4.7	Butansäure	78
4.7.1	Probenaufbereitung.....	78
4.7.2	Beschreibung des Prüferkollektivs.....	78
4.7.3	Geruchsstoffkonzentration.....	79
4.7.4	Intensitäten und Weber-Fechner-Koeffizient.....	81
4.7.5	Hedonische Geruchswirkung	83
4.7.6	Geruchscharakter.....	83
4.8	Essigsäure.....	84
4.8.1	Probenaufbereitung.....	84
4.8.2	Beschreibung des Prüferkollektivs.....	84
4.8.3	Geruchsstoffkonzentration.....	85
4.8.4	Intensitäten und Weber-Fechner-Koeffizient.....	87
4.8.5	Hedonische Geruchswirkung	89
4.8.6	Geruchscharakter.....	89
4.9	Hexanal.....	90
4.9.1	Probenaufbereitung.....	90
4.9.2	Beschreibung des Prüferkollektivs.....	90
4.9.3	Geruchsstoffkonzentration.....	91
4.9.4	Intensitäten und Weber-Fechner-Koeffizient.....	93
4.9.5	Hedonische Geruchswirkung	95
4.9.6	Geruchscharakter.....	95
4.10	Nonanal	96
4.10.1	Probenaufbereitung.....	96
4.10.2	Beschreibung des Prüferkollektivs.....	96
4.10.3	Geruchsstoffkonzentration.....	97
4.10.4	Intensitäten und Weber-Fechner-Koeffizient.....	99
4.10.5	Hedonische Geruchswirkung	101
4.10.6	Geruchscharakter.....	101
4.11	m-Kresol	102
4.11.1	Probenaufbereitung.....	102
4.11.2	Beschreibung des Prüferkollektivs.....	102
4.11.3	Geruchsstoffkonzentration.....	103
4.11.4	Intensitäten und Weber-Fechner-Koeffizient.....	105

4.11.5	Hedonische Geruchswirkung	107
4.11.6	Geruchscharakter.....	107
4.12	Hexansäure	108
4.12.1	Probenaufbereitung.....	108
4.12.2	Beschreibung des Prüferkollektivs.....	108
4.12.3	Geruchsstoffkonzentration	109
4.12.4	Intensitäten und Weber-Fechner-Koeffizient.....	111
4.12.5	Hedonische Geruchswirkung	113
4.12.6	Geruchscharakter.....	113
4.13	p-Kresol	114
4.13.1	Probenaufbereitung.....	114
4.13.2	Beschreibung des Prüferkollektivs.....	114
4.13.3	Geruchsstoffkonzentration	115
4.13.4	Intensitäten und Weber-Fechner-Koeffizient.....	117
4.13.5	Hedonische Geruchswirkung	119
4.13.6	Geruchscharakter.....	119
4.14	2,4,6-Trichloranisol	120
4.14.1	Probenaufbereitung.....	120
4.14.2	Beschreibung des Prüferkollektivs.....	120
4.14.3	Geruchsstoffkonzentration	121
4.14.4	Intensitäten und Weber-Fechner-Koeffizient.....	123
4.14.5	Hedonische Geruchswirkung	125
4.14.6	Geruchscharakter.....	125
4.15	Naphthalin.....	126
4.15.1	Probenaufbereitung.....	126
4.15.1	Beschreibung des Prüferkollektivs.....	126
4.15.2	Geruchsstoffkonzentration	127
4.15.3	Intensitäten und Weber-Fechner-Koeffizient.....	129
4.15.4	Hedonische Geruchswirkung	131
4.15.5	Geruchscharakter.....	131
4.16	1-Methylnaphthalin	132
4.16.1	Probenaufbereitung.....	132
4.16.2	Beschreibung des Prüferkollektivs.....	132
4.16.3	Geruchsstoffkonzentration	133

4.16.4	Intensitäten und Weber-Fechner-Koeffizient.....	135
4.16.5	Hedonische Geruchswirkung	137
4.16.6	Geruchscharakter.....	137
4.17	2-Methylnaphthalin	138
4.17.1	Probenaufbereitung.....	138
4.17.2	Beschreibung des Prüferkollektivs.....	138
4.17.3	Geruchsstoffkonzentration	139
4.17.4	Intensitäten und Weber-Fechner-Koeffizient.....	141
4.17.5	Hedonische Geruchswirkung	143
4.17.6	Geruchscharakter.....	143
4.18	1,4-Dimethylnaphthalin	144
4.18.1	Probenaufbereitung.....	144
4.18.2	Beschreibung des Prüferkollektivs.....	144
4.18.3	Geruchsstoffkonzentration	145
4.18.4	Intensitäten und Weber-Fechner-Koeffizient.....	147
4.18.5	Hedonische Geruchswirkung	149
4.18.6	Geruchscharakter.....	149
4.19	Caprolactam	150
4.19.1	Probenaufbereitung.....	150
4.19.2	Beschreibung des Prüferkollektivs.....	150
4.19.3	Geruchsstoffkonzentration	151
4.19.4	Intensitäten und Weber-Fechner-Koeffizient.....	153
4.19.5	Hedonische Geruchswirkung	155
4.19.6	Geruchscharakter.....	155
4.20	Phenol	156
4.20.1	Probenaufbereitung.....	156
4.20.2	Beschreibung des Prüferkollektivs.....	156
4.20.3	Geruchsstoffkonzentration	157
4.20.4	Intensitäten und Weber-Fechner-Koeffizient.....	159
4.20.5	Hedonische Geruchswirkung	161
4.20.6	Geruchscharakter.....	161
4.21	2-Butanonoxim.....	162
4.21.1	Probenaufbereitung.....	162
4.21.2	Beschreibung des Prüferkollektivs.....	162

4.21.3	Geruchsstoffkonzentration.....	163
4.21.4	Intensitäten und Weber-Fechner-Koeffizient.....	165
4.21.5	Hedonische Geruchswirkung	167
4.21.6	Geruchscharakter.....	167
5	Analytik.....	168
5.1	Allgemeine Messdurchführung und Prüfergebnisse	168
5.2	Plausibilität und Diskussion.....	176
6	Quellenverzeichnis	182
A	Anhang	183
A.1	Intensitätsbewertungen.....	183
A.1.1	Aceton	184
A.1.2	2-Ethylhexanol	185
A.1.3	Acetophenon.....	186
A.1.4	Benzothiazol.....	187
A.1.5	2-Phenoxyethanol.....	188
A.1.6	Butansäure.....	189
A.1.7	Essigsäure.....	190
A.1.8	Hexanal	191
A.1.9	Nonanal.....	192
A.1.10	m-Kresol	193
A.1.11	Hexansäure	194
A.1.12	p-Kresol	195
A.1.13	2,4,6-Trichloranisol	196
A.1.14	Naphthalin	197
A.1.15	1-Methylnaphthalin	198
A.1.16	2-Methylnaphthalin	199
A.1.17	1,4-Dimethylnaphthalin	200
A.1.18	Caprolactam.....	201
A.1.19	Phenol	202
A.1.20	2-Butanonoxim	203

Abbildungsverzeichnis

Abbildung 1:	Geruchsbewertung an einem TO8-Olfaktometer.....	29
Abbildung 2:	Auszug aus einem Polaritätenprofil.....	33
Abbildung 3:	Repräsentative Polaritätenprofile für Duft und Gestank [VDI 3940 Blatt 4]	34
Abbildung 4:	Nachweis der Methodenpräzision mittels Referenzsubstanz TD8 (Angaben prozentual zum Sollwert).....	43
Abbildung 5:	Aceton - Intensitätskennlinien für $\hat{Z}_{16}$, $\hat{Z}_{50}$ und $\hat{Z}_{84}$ nach VDI 3882-1.....	52
Abbildung 6:	Aceton – Polaritätenprofil für Aceton, Duft und Gestank.....	53
Abbildung 7:	2-Ethylhexanol – Intensitätskennlinien für $\hat{Z}_{16}$, $\hat{Z}_{50}$ und $\hat{Z}_{84}$ nach VDI 3882-1	58
Abbildung 8:	2-Ethylhexanol – Polaritätenprofil für 2-Ethylhexanol, Duft und Gestank.....	59
Abbildung 9:	Acetophenon – Intensitätskennlinien für $\hat{Z}_{16}$, $\hat{Z}_{50}$ und $\hat{Z}_{84}$ nach VDI 3882-1	64
Abbildung 10:	Acetophenon – Polaritätenprofil für Acetophenon, Duft und Gestank.....	65
Abbildung 11:	Benzothiazol – Intensitätskennlinien für $\hat{Z}_{16}$, $\hat{Z}_{50}$ und $\hat{Z}_{84}$ nach VDI 3882-1	70
Abbildung 12:	Benzothiazol – Polaritätenprofil für Benzothiazol, Duft und Gestank.....	71
Abbildung 13:	2-Phenoxyethanol – Intensitätskennlinien für $\hat{Z}_{16}$, $\hat{Z}_{50}$ und $\hat{Z}_{84}$ nach VDI 3882-1	76
Abbildung 14:	2-Phenoxyethanol – Polaritätenprofil für 2-Phenoxyethanol, Duft und Gestank.....	77
Abbildung 15:	Butansäure – Intensitätskennlinien für $\hat{Z}_{16}$, $\hat{Z}_{50}$ und $\hat{Z}_{84}$ nach VDI 3882-1	82
Abbildung 16:	Butansäure – Polaritätenprofil für Butansäure, Duft und Gestank.....	83
Abbildung 17:	Essigsäure – Intensitätskennlinien für $\hat{Z}_{16}$, $\hat{Z}_{50}$ und $\hat{Z}_{84}$ nach VDI 3882-1	88
Abbildung 18:	Essigsäure – Polaritätenprofil für Essigsäure, Duft und Gestank	89
Abbildung 19:	Hexanal – Intensitätskennlinien für $\hat{Z}_{16}$, $\hat{Z}_{50}$ und $\hat{Z}_{84}$ nach VDI 3882-1.....	94
Abbildung 20:	Hexanal – Polaritätenprofil für Hexanal, Duft und Gestank.....	95
Abbildung 21:	Nonanal – Intensitätskennlinien für $\hat{Z}_{16}$, $\hat{Z}_{50}$ und $\hat{Z}_{84}$ nach VDI 3882-1.....	100
Abbildung 22:	Nonanal – Polaritätenprofil für Nonanal, Duft und Gestank..	101
Abbildung 23:	m-Kresol – Intensitätskennlinien für $\hat{Z}_{16}$, $\hat{Z}_{50}$ und $\hat{Z}_{84}$ nach VDI 3882-1.....	106

Abbildung 24:	m-Kresol – Polaritätenprofil für m-Kresol, Duft und Gestank	107
Abbildung 25:	Hexansäure – Intensitätskennlinien für $\hat{Z}_{16}$, $\hat{Z}_{50}$ und $\hat{Z}_{84}$ nach VDI 3882-1	112
Abbildung 26:	Hexansäure – Polaritätenprofil für Hexansäure, Duft und Gestank.....	113
Abbildung 27:	p-Kresol – Intensitätskennlinien für $\hat{Z}_{16}$, $\hat{Z}_{50}$ und $\hat{Z}_{84}$ nach VDI 3882-1.....	118
Abbildung 28:	p-Kresol – Polaritätenprofil für p-Kresol, Duft und Gestank ..	119
Abbildung 29:	2,4,6-Trichloranisol – Intensitätskennlinien für $\hat{Z}_{16}$, $\hat{Z}_{50}$ und $\hat{Z}_{84}$ nach VDI 3882-1.....	124
Abbildung 30:	2,4,6-Trichloranisol – Polaritätenprofil für 2,4,6-Trichloranisol, Duft und Gestank.....	125
Abbildung 31:	Naphthalin – Intensitätskennlinien für $\hat{Z}_{16}$, $\hat{Z}_{50}$ und $\hat{Z}_{84}$ nach VDI 3882-1	130
Abbildung 32:	Naphthalin – Polaritätenprofil für Naphthalin, Duft und Gestank.....	131
Abbildung 33:	1-Methylnaphthalin – Intensitätskennlinien für $\hat{Z}_{16}$, $\hat{Z}_{50}$ und $\hat{Z}_{84}$ nach VDI 3882-1.....	136
Abbildung 34:	1-Methylnaphthalin – Polaritätenprofil für 1-Methylnaphthalin, Duft und Gestank.....	137
Abbildung 35:	2-Methylnaphthalin – Intensitätskennlinien für $\hat{Z}_{16}$, $\hat{Z}_{50}$ und $\hat{Z}_{84}$ nach VDI 3882-1.....	142
Abbildung 36:	2-Methylnaphthalin – Polaritätenprofil für 2-Methylnaphthalin, Duft und Gestank.....	143
Abbildung 37:	1,4-Dimethylnaphthalin - Intensitätskennlinien für $\hat{Z}_{16}$, $\hat{Z}_{50}$ und $\hat{Z}_{84}$ nach VDI 3882-1	148
Abbildung 38:	1,4-Dimethylnaphthalin – Polaritätenprofil für 1,4-Dimethylnaphthalin, Duft und Gestank.....	149
Abbildung 39:	Caprolactam – Intensitätskennlinie für $\hat{Z}_{16}$, $\hat{Z}_{50}$ und $\hat{Z}_{84}$ nach 3882-1.....	154
Abbildung 40:	Caprolactam – Polaritätenprofil für Caprolactam, Duft und Gestank.....	155
Abbildung 41:	Phenol – Intensitätskennlinien für $\hat{Z}_{16}$, $\hat{Z}_{50}$ und $\hat{Z}_{84}$ nach VDI 3882-1.....	160
Abbildung 42:	Phenol – Polaritätenprofil für Phenol, Duft und Gestank	161
Abbildung 43:	2-Butanonoxim – Intensitätskennlinie für $\hat{Z}_{16}$, $\hat{Z}_{50}$ und $\hat{Z}_{84}$ nach 3882-1	166
Abbildung 44:	2-Butanonoxim – Polaritätenprofil für 2-Butanonoxim, Duft und Gestank.....	167
Abbildung 45:	Plausibilitätsüberprüfung rechnerischer Konzentrationen im Vergleich zur analytisch mittels FID und GC-MS ermittelten Konzentrationen	177

Tabellenverzeichnis

Tabelle 1:	Übersicht der 20 zu untersuchenden Substanzen.....	28
Tabelle 2:	Kategorienskalisierung zur Beurteilung der Geruchsintensität nach VDI 3882 Blatt 1	32
Tabelle 3:	Parameter der 20 zu untersuchenden Substanzen	39
Tabelle 4:	Übersicht verwendeter Standards für die GC-MS Kalibrierung als Feststoffe vorliegender Substanzen.....	41
Tabelle 5:	Aceton – Prüferüberprüfung nach DIN EN 13725	48
Tabelle 6:	Aceton – Geruchsempfindlichkeit der Teams auf n-Butanol nach DIN EN 13725	49
Tabelle 7:	Aceton – Geruchsstoffkonzentration nach DIN EN 13725	50
Tabelle 8:	Aceton – Zuordnung der prozentualen Häufigkeiten der Intensitätsüberschreitungen zu den vorgegebenen Logarithmen der Verdünnungszahlen	51
Tabelle 9:	Aceton – Kenngrößen der Intensitätsstufen I_s	51
Tabelle 10:	Aceton – Parameter der Geradengleichungen der 16-, 50- und 84-Perzentile.....	52
Tabelle 11:	2-Ethylhexanol – Prüferüberprüfung nach DIN EN 13725	54
Tabelle 12:	2-Ethylhexanol – Geruchsempfindlichkeit der Teams auf n- Butanol nach DIN EN 13725	55
Tabelle 13:	2-Ethylhexanol – Geruchsstoffkonzentration nach DIN EN 13725	56
Tabelle 14:	2-Ethylhexanol – Zuordnung der prozentualen Häufigkeiten der Intensitätsüberschreitungen zu den vorgegebenen Logarithmen der Verdünnungszahlen	57
Tabelle 15:	2-Ethylhexanol – Kenngrößen der Intensitätsstufen I_s	57
Tabelle 16:	2-Ethylhexanol – Parameter der Geradengleichungen der 16-, 50- und 84-Perzentile	58
Tabelle 17:	Acetophenon – Prüferüberprüfung nach DIN EN 13725	60
Tabelle 18:	Acetophenon – Geruchsempfindlichkeit der Teams auf n- Butanol nach DIN EN 13725	61
Tabelle 19:	Acetophenon – Geruchsstoffkonzentration nach DIN EN 13725	62
Tabelle 20:	Acetophenon – Zuordnung der prozentualen Häufigkeiten der Intensitätsüberschreitungen zu den vorgegebenen Logarithmen der Verdünnungszahlen	63
Tabelle 21:	Acetophenon – Kenngrößen der Intensitätsstufen I_s	63
Tabelle 22:	Acetophenon – Parameter der Geradengleichungen der 16-, 50- und 84-Perzentile	64
Tabelle 23:	Benzothiazol – Prüferüberprüfung nach DIN EN 13725	66
Tabelle 24:	Benzothiazol – Geruchsempfindlichkeit der Teams auf n- Butanol nach DIN EN 13725	67

Tabelle 25:	Benzothiazol – Geruchsstoffkonzentration nach DIN EN 13725	68
Tabelle 26:	Benzothiazol – Zuordnung der prozentualen Häufigkeiten der Intensitätsüberschreitungen zu den vorgegebenen Logarithmen der Verdünnungszahlen	69
Tabelle 27:	Benzothiazol – Kenngrößen der Intensitätsstufen I_5	69
Tabelle 28:	Benzothiazol – Parameter der Geradengleichungen der 16-, 50- und 84-Perzentile	70
Tabelle 29:	2-Phenoxyethanol – Prüferüberprüfung nach DIN EN 13725 ..	72
Tabelle 30:	2-Phenoxyethanol – Geruchsempfindlichkeit der Teams auf n- Butanol nach DIN EN 13725	73
Tabelle 31:	2-Phenoxyethanol – Geruchsstoffkonzentration nach DIN EN 13725	74
Tabelle 32:	2-Phenoxyethanol – Zuordnung der prozentualen Häufigkeiten der Intensitätsüberschreitungen zu den vorgegebenen Logarithmen der Verdünnungszahlen	75
Tabelle 33:	2-Phenoxyethanol – Kenngrößen der Intensitätsstufen I_5	75
Tabelle 34:	2-Phenoxyethanol – Parameter der Geradengleichungen der 16-, 50- und 84-Perzentile	76
Tabelle 35:	Butansäure – Prüferüberprüfung nach DIN EN 13725	78
Tabelle 36:	Butansäure – Geruchsempfindlichkeit der Teams auf n-Butanol nach DIN EN 13725	79
Tabelle 37:	Butansäure – Geruchsstoffkonzentration nach DIN EN 13725	80
Tabelle 38:	Butansäure – Zuordnung der prozentualen Häufigkeiten der Intensitätsüberschreitungen zu den vorgegebenen Logarithmen der Verdünnungszahlen	81
Tabelle 39:	Butansäure – Kenngrößen der Intensitätsstufen I_5	81
Tabelle 40:	Butansäure – Parameter der Geradengleichungen der 16-, 50- und 84-Perzentile	82
Tabelle 41:	Essigsäure – Prüferüberprüfung nach DIN EN 13725	84
Tabelle 42:	Essigsäure – Geruchsempfindlichkeit der Teams auf n-Butanol nach DIN EN 13725	85
Tabelle 43:	Essigsäure – Geruchsstoffkonzentration nach DIN EN 13725 ..	86
Tabelle 44:	Essigsäure – Zuordnung der prozentualen Häufigkeiten der Intensitätsüberschreitungen zu den vorgegebenen Logarithmen der Verdünnungszahlen	87
Tabelle 45:	Essigsäure – Kenngrößen der Intensitätsstufen I_5	87
Tabelle 46:	Essigsäure – Parameter der Geradengleichungen der 16-, 50- und 84-Perzentile	88
Tabelle 47:	Hexanal – Prüferüberprüfung nach DIN EN 13725	90
Tabelle 48:	Hexanal – Geruchsempfindlichkeit der Teams auf n-Butanol nach DIN EN 13725	91
Tabelle 49:	Hexanal – Geruchsstoffkonzentration nach DIN EN 13725	92

Tabelle 50:	Hexanal – Zuordnung der Häufigkeiten der Intensitätsüberschreitungen zu den vorgegebenen Logarithmen der Verdünnungszahlen	93
Tabelle 51:	Hexanal – Kenngrößen der Intensitätsstufen I_s	93
Tabelle 52:	Hexanal – Parameter der Geradengleichungen der 16-, 50- und 84-Perzentile	94
Tabelle 53:	Nonanal – Prüferüberprüfung nach DIN EN 13725	96
Tabelle 54:	Nonanal – Geruchsempfindlichkeit der Teams auf n-Butanol nach DIN EN 13725	97
Tabelle 55:	Nonanal – Geruchsstoffkonzentration nach DIN EN 13725	98
Tabelle 56:	Nonanal – Zuordnung der Häufigkeiten der Intensitätsüberschreitungen zu den vorgegebenen Logarithmen der Verdünnungszahlen	99
Tabelle 57:	Nonanal – Kenngrößen der Intensitätsstufen I_s	99
Tabelle 58:	Nonanal – Parameter der Geradengleichungen der 16-, 50- und 84-Perzentile	100
Tabelle 59:	m-Kresol – Prüferüberprüfung nach DIN EN 13725	102
Tabelle 60:	m-Kresol – Geruchsempfindlichkeit der Teams auf n-Butanol nach DIN EN 13725	103
Tabelle 61:	m-Kresol – Geruchsstoffkonzentration nach DIN EN 13725 ..	104
Tabelle 62:	m-Kresol – Zuordnung der Häufigkeiten der Intensitätsüberschreitungen zu den vorgegebenen Logarithmen der Verdünnungszahlen	105
Tabelle 63:	m-Kresol – Kenngrößen der Intensitätsstufen I_s	105
Tabelle 64:	m-Kresol – Parameter der Geradengleichungen der 16-, 50- und 84-Perzentile	106
Tabelle 65:	Hexansäure – Prüferüberprüfung nach DIN EN 13725	108
Tabelle 66:	Hexansäure – Geruchsempfindlichkeit der Teams auf n-Butanol nach DIN EN 13725	109
Tabelle 67:	Hexansäure – Geruchsstoffkonzentration nach DIN EN 13725	110
Tabelle 68:	Hexansäure – Zuordnung der Häufigkeiten der Intensitätsüberschreitungen zu den vorgegebenen Logarithmen der Verdünnungszahlen	111
Tabelle 69:	Hexansäure – Kenngrößen der Intensitätsstufen I_s	111
Tabelle 70:	Hexansäure – Parameter der Geradengleichungen der 16-, 50- und 84-Perzentile	112
Tabelle 71:	p-Kresol – Prüferüberprüfung nach DIN EN 13725	114
Tabelle 72:	p-Kresol – Geruchsempfindlichkeit der Teams auf n-Butanol nach DIN EN 13725	115
Tabelle 73:	p-Kresol – Geruchsstoffkonzentration nach DIN EN 13725 ...	116

Tabelle 74:	p-Kresol – Zuordnung der Häufigkeiten der Intensitätsüberschreitungen zu den vorgegebenen Logarithmen der Verdünnungszahlen	117
Tabelle 75:	p-Kresol – Kenngrößen der Intensitätsstufen I_s	117
Tabelle 76:	p-Kresol – Parameter der Geradengleichungen der 16-, 50- und 84-Perzentile.....	118
Tabelle 77:	2,4,6-Trichloranisol – Prüferüberprüfung nach DIN EN 13725	120
Tabelle 78:	2,4,6-Trichloranisol – Geruchsempfindlichkeit der Teams auf n-Butanol nach DIN EN 13725	121
Tabelle 79:	2,4,6-Trichloranisol – Geruchsstoffkonzentration nach DIN EN 13725	122
Tabelle 80:	2,4,6-Trichloranisol – Zuordnung der Häufigkeiten der Intensitätsüberschreitungen zu den vorgegebenen Logarithmen der Verdünnungszahlen	123
Tabelle 81:	2,4,6-Trichloranisol – Kenngrößen der Intensitätsstufen I_s ...	123
Tabelle 82:	2,4,6-Trichloranisol – Parameter der Geradengleichungen der 16-, 50- und 84-Perzentile	124
Tabelle 83:	Naphthalin – Prüferüberprüfung nach DIN EN 13725.....	126
Tabelle 84:	Naphthalin – Geruchsempfindlichkeit der Teams auf n-Butanol nach DIN EN 13725	127
Tabelle 85:	Naphthalin – Geruchsstoffkonzentration nach DIN EN 13725	128
Tabelle 86:	Naphthalin – Zuordnung der Häufigkeiten der Intensitätsüberschreitungen zu den vorgegebenen Logarithmen der Verdünnungszahlen	129
Tabelle 87:	Naphthalin – Kenngrößen der Intensitätsstufen I_s	129
Tabelle 88:	Naphthalin – Parameter der Geradengleichungen der 16-, 50- und 84-Perzentile	130
Tabelle 89:	1-Methylnaphthalin – Prüferüberprüfung nach DIN EN 13725	132
Tabelle 90:	1-Methylnaphthalin – Geruchsempfindlichkeit der Teams auf n-Butanol nach DIN EN 13725	133
Tabelle 91:	1-Methylnaphthalin – Geruchsstoffkonzentration nach DIN EN 13725	134
Tabelle 92:	1-Methylnaphthalin – Zuordnung der Häufigkeiten der Intensitätsüberschreitungen zu den vorgegebenen Logarithmen der Verdünnungszahlen	135
Tabelle 93:	1-Methylnaphthalin – Kenngrößen der Intensitätsstufen I_s ..	135
Tabelle 94:	1-Methylnaphthalin – Parameter der Geradengleichungen der 16-, 50- und 84-Perzentile	136
Tabelle 95:	2-Methylnaphthalin – Prüferüberprüfung nach DIN EN 13725	138

Tabelle 96:	2-Methylnaphthalin – Geruchsempfindlichkeit der Teams auf n-Butanol nach DIN EN 13725139
Tabelle 97:	2-Methylnaphthalin – Geruchsstoffkonzentration nach DIN EN 13725140
Tabelle 98:	2-Methylnaphthalin – Zuordnung der Häufigkeiten der Intensitätsüberschreitungen zu den vorgegebenen Logarithmen der Verdünnungszahlen141
Tabelle 99:	2-Methylnaphthalin – Kenngrößen der Intensitätsstufen I_5 ..141
Tabelle 100:	2-Methylnaphthalin – Parameter der Geradengleichungen der 16-, 50- und 84-Perzentile142
Tabelle 101:	1,4-Dimethylnaphthalin – Prüferüberprüfung nach DIN EN 13725144
Tabelle 102:	1,4-Dimethylnaphthalin – Geruchsempfindlichkeit der Teams auf n-Butanol nach DIN EN 13725145
Tabelle 103:	1,4-Dimethylnaphthalin – Geruchsstoffkonzentration nach DIN EN 13725146
Tabelle 104:	1,4-Dimethylnaphthalin – Zuordnung der Häufigkeiten der Intensitätsüberschreitungen zu den vorgegebenen Logarithmen der Verdünnungszahlen147
Tabelle 105:	1,4-Dimethylnaphthalin – Kenngrößen der Intensitätsstufen I_5147
Tabelle 106:	1,4-Dimethylnaphthalin – Parameter der Geradengleichungen der 16-, 50- und 84-Perzentile.....148
Tabelle 107:	Caprolactam – Prüferüberprüfung nach DIN EN 13725150
Tabelle 108:	Caprolactam – Geruchsempfindlichkeit der Teams auf n- Butanol nach DIN EN 13725151
Tabelle 109:	Caprolactam – Geruchsstoffkonzentration nach DIN EN 13725152
Tabelle 110:	Caprolactam – Zuordnung der Häufigkeiten der Intensitätsüberschreitungen zu den vorgegebenen Logarithmen der Verdünnungszahlen153
Tabelle 111:	Caprolactam – Kenngrößen der Intensitätsstufen I_5153
Tabelle 112:	Caprolactam – Parameter der Geradengleichungen der 16-, 50- und 84-Perzentile154
Tabelle 113:	Phenol – Prüferüberprüfung nach DIN EN 13725156
Tabelle 114:	Phenol – Geruchsempfindlichkeit der Teams auf n-Butanol nach DIN EN 13725157
Tabelle 115:	Phenol – Geruchsstoffkonzentration nach DIN EN 13725158
Tabelle 116:	Phenol – Zuordnung der Häufigkeiten der Intensitätsüberschreitungen zu den vorgegebenen Logarithmen der Verdünnungszahlen159
Tabelle 117:	Phenol – Kenngrößen der Intensitätsstufen I_5159

Tabelle 118:	Phenol – Parameter der Geradengleichungen der 16-, 50- und 84-Perzentile.....	160
Tabelle 119:	2-Butanonoxim – Prüferüberprüfung nach DIN EN 13725.....	162
Tabelle 120:	2-Butanonoxim – Geruchsempfindlichkeit der Teams auf n-Butanol nach DIN EN 13725	163
Tabelle 121:	2-Butanonoxim – Geruchsstoffkonzentration nach DIN EN 13725	164
Tabelle 122:	2-Butanonoxim – Zuordnung der Häufigkeiten der Intensitätsüberschreitungen zu den vorgegebenen Logarithmen der Verdünnungszahlen	165
Tabelle 123:	2-Butanonoxim – Kenngrößen der Intensitätsstufen I ₅	165
Tabelle 124:	2-Butanonoxim – Parameter der Geradengleichungen der 16-, 50- und 84-Perzentile	166
Tabelle 125:	GC-IMS-Messungen mit jeweils einer Messung vor, während und nach der olfaktometrischen Probenbewertung (chronologisch von oben nach unten).....	169
Tabelle 126:	Verwendete Analysenmethode je Substanz und Analysen- und Kalibrierdaten der Einzelsubstanzen aus der GC-MS	170
Tabelle 127:	Probenahmebedingungen und Messergebnisse aus FID, GC-MS und GC-IMS-Analysen.....	173
Tabelle 128:	Geruchsschwellenwerte auf Basis rechnerischer und analytischer Substanzkonzentrationen im Mutterbeutel	179
Tabelle 129:	Aceton - Intensitätsbewertungen.....	184
Tabelle 130:	2-Ethylhexanol - Intensitätsbewertungen	185
Tabelle 131:	Acetophenon - Intensitätsbewertungen	186
Tabelle 132:	Benzothiazol – Intensitätsbewertungen.....	187
Tabelle 133:	2-Phenoxyethanol – Intensitätsbewertungen.....	188
Tabelle 134:	Butansäure– Intensitätsbewertungen.....	189
Tabelle 135:	Essigsäure – Intensitätsbewertungen.....	190
Tabelle 136:	Hexanal – Intensitätsbewertungen	191
Tabelle 137:	Nonanal - Intensitätsbewertungen	192
Tabelle 138:	m-Kresol - Intensitätsbewertungen.....	193
Tabelle 139:	Hexansäure - Intensitätsbewertungen.....	194
Tabelle 140:	p-Kresol - Intensitätsbewertungen.....	195
Tabelle 141:	2,4,6-Trichloranisol - Intensitätsbewertungen.....	196
Tabelle 142:	Naphthalin - Intensitätsbewertungen	197
Tabelle 143:	1-Methylnaphthalin - Intensitätsbewertungen.....	198
Tabelle 144:	2-Methylnaphthalin - Intensitätsbewertungen.....	199
Tabelle 145:	1,4-Dimethylnaphthalin - Intensitätsbewertungen.....	200
Tabelle 146:	Caprolactam - Intensitätsbewertungen.....	201
Tabelle 147:	Phenol - Intensitätsbewertungen.....	202
Tabelle 148:	2-Butanonoxim – Intensitätsbewertungen	203

Abkürzungsverzeichnis

AIR	Ausschuss für Innenraumrichtwerte
FID	Flammenionisationsdetektor
GC	Gaschromatograph / Gaschromatographie
GE_E	europäische Geruchseinheit
GLW	Geruchsleitwerte
GWS	Geruchswahrnehmungsschwelle
LiGaVa	Liquid to Gas Vaporiser (engl. für Probenahmesystem, welches jede Art von Flüssigkeit in die Gasphase verdampft)
MS	Massenspektrometer / Massenspektrometrie
ODT	odour detection threshold (engl. für Geruchswahrnehmungsschwelle)
TDS	Thermodesorption
VOC	volatile organic compounds (engl. für flüchtige organische Verbindungen)

Zusammenfassung

Der Ausschuss für Innenraumrichtwerte (AIR) veröffentlichte im Jahr 2014 ein erstes Konzept zur gesundheitlich-hygienischen Beurteilung von Geruchsstoffen in der Innenraumluft mittels Geruchsleitwerten (GLW) [Ad-hoc-AG, 2014]. Das GLW-Konzept befand sich bis Dezember 2015 in der Erprobungsphase. Nach Ablauf der Erprobungsphase wurden die eingegangenen Stellungnahmen ausgewertet. Der AIR bereitet derzeit eine entsprechende Überarbeitung des Bewertungsschemas vor. Gleichzeitig war die Ableitung von GLWs aufgrund der wenigen vorhandenen Geruchswahrnehmungsschwellen nur für wenige Stoffe möglich. Aus diesem Grund sollen im Rahmen des Projektes Geruchswahrnehmungsschwellen für 20 Substanzen (siehe Tabelle unten) ermittelt werden. Ebenso sollen die Weber-Fechner-Koeffizienten und die Hedonik der einzelnen Stoffe bestimmt werden. Diese Parameter können dann stoffspezifisch im neuen GLW-Konzept berücksichtigt werden. Das Ziel dieses Vorhabens ist daher die Bestimmung der Geruchswahrnehmungsschwellen, der Geruchsintensitäten im vornehmlich überschwelligen Bereich und der Hedonik für 20 ausgewählte Geruchsstoffe in der Luft. Die Ergebnisse des Projekts sollen in das neue Konzept des AIR einfließen.

Übersicht 20 Substanzen

Liste der 20 zu untersuchenden Substanzen

Substanz-Name	Substanz-Name	Substanz-Name	Substanz-Name
Aceton	Butansäure	Hexansäure	2-Methylnaphthalin
2-Ethylhexanol	Essigsäure	p-Kresol	1,4-Dimethylnaphthalin
Acetophenon	Hexanal	2,4,6-Trichloranisol	ε-Caprolactam
Benzothiazol	Nonanal	Naphthalin	Phenol
2-Phenoxyethanol	m-Kresol	1-Methylnaphthalin	2-Butanonoxim

Für alle im Projekt untersuchten Substanzen wurde das gleiche Vorgehen gewählt. Zunächst wurden Vorversuche durchgeführt, um die Überführung der Substanzen in die Gasphase mittels Verdampfung in einem Liquid to Gas Vaporiser (LiGaVa) in der benötigten Konzentration sicherzustellen. Substanzen, die bei Raumtemperatur als Feststoffe vorliegen, wurden für diesen Zweck zuvor in einem möglichst geruchsneutralen Lösungsmittel gelöst. Mit dem auf diese Weise hergestellten Mutterbeutel (MB) wurden die weiteren Untersuchungen für das Projekt durchgeführt. Durch die Weiterverwendung der individuellen Mutterbeutel aus den Vorversuchen sollten Wandeffekte in den verwendeten Nalophan®-Beuteln reduziert werden.

Die eingesetzten Prüfer sind Bestandteil des Olfasense Prüferkollektivs und nach DIN EN 13725 selektiert und trainiert. Für die Bestimmung der Parameter Geruchsstoffkonzentration beziehungsweise Geruchsschwelle, Geruchsintensität und hedonische Geruchswirkung werden die Bewertungen von jeweils 12 Prüfern verwendet.

Die Bestimmung der Geruchsstoffkonzentration wurde gemäß DIN EN 13725:2003 „Luftqualität -Bestimmung der Geruchsstoffkonzentration mittels dynamischer Olfaktometrie“ mit einem T08s-Olfaktometer vorgenommen und damit Rückschluss auf die Geruchsschwelle gezogen. Als Referenzstoff dient definitionsgemäß n-Butanol (Cas.-Nr. 71-36-3). Eine Geruchs- oder n-Butanol-Probe wird den Prüfern in sinkender Verdünnung, d.h. mit zunehmender Konzentration, im Wechsel mit neutraler Referenzluft dargeboten. Sobald die Prüfer den Geruch wahrnehmen, bestätigen die diese Wahrnehmung. Es werden von jedem Prüfer jeweils 10

gültige Schwellenschätzungen zur Bestimmung der Geruchsstoffkonzentration abgegeben und die Geruchsstoffkonzentration in GE_E/m^3 als geometrischer Mittelwert ermittelt.

Die Bestimmung der Geruchsintensität erfolgt entsprechend VDI 3882 Blatt 1 nach dem Konstanzverfahren. Ziel der Intensitätsbewertung war es, jeweils mindestens 2 unterschwellige und 6 überschwellige Intensitäten darzubieten. Nach der Darbietung schaltet sich das Olfaktometer aus und die Prüfer geben ihre Bewertung auf einer siebenstufigen Kategorienskala von 0 (nicht wahrnehmbar) bis 6 (extrem stark) an. Aus diesen Intensitätsbewertungen lassen sich sogenannte Intensitätskennlinien ableiten, aus denen sich wiederum Weber-Fechner-Koeffizienten ableiten lassen.

Zur Ermittlung der Hedonik der 20 Substanzen wird das Verfahren zur Bestimmung der hedonischen Geruchswirkung in Anlehnung an VDI 3940 Blatt 4 angewendet. Von jedem Prüfer werden dabei insgesamt 3 Polaritätenprofile erhoben: Duft, Gestank und Geruchsstoff. Die Bewertungen eingesetzter Prüfer werden gemittelt, mit in der VDI 3940 Blatt 4 definierten Hedonik-Faktor-Scores multipliziert und anschließend in einem Diagramm aufgetragen. Aus den ermittelten Daten werden entsprechend VDI 3940 Blatt 4 die Produkt-Moment-Korrelationskoeffizienten nach Pearson für die Konzepte Duft und Gestank abgeleitet.

Zur Qualitätssicherung wurde für die 20 Substanzen, wenn analytisch möglich, die Konzentration der Geruchsstoffe an der Schnittstelle Nase-Olfaktometer mittels GC-MS bestimmt. Die Ergebnisse zeigen keine systematischen Fehler. Für die analysierten Stoffe zeigte eine Plausibilitätsprüfung überwiegend hohe Übereinstimmung zwischen rechnerisch eingestellter und analytisch ermittelter Konzentration. Für einige Stoffe wurden analytisch deutlich geringere Konzentrationen ermittelt, sodass die Berücksichtigung der geringer Wiederfindungsrate einzelner Stoffe im Nalophan®-Beutel bei der Berechnung der Geruchsschwelle empfohlen wird.

Alle vorgenannten Parameter sind in der nachfolgenden Tabelle zusammengestellt. Geruchsschwellenwerte sind auf Basis der rechnerisch ermittelten Konzentrationen angegeben. Diese sind in Abhängigkeit des 95% Konfidenzintervalls mit unterer und oberer Grenze entsprechend DIN EN 13725 angegeben.

Zusammenfassung ermittelter Parameter der 20 untersuchten Substanzen

Angabe der rechnerischen Konzentration an der Geruchsschwelle als Erwartungswert sowie der unteren und oberen Grenze in Abhängigkeit des 95% Konfidenzintervalls; Weber-Fechner-Koeffizient und Korrelation des Substanzgeruches mit den Konzepten „Duft“ und „Gestank“.

Substanz	rechnerische Geruchsschwelle untere Grenze des 95% Konfidenzintervalls [mg/m ³]	rechnerische Geruchsschwelle <i>Erwartungswert</i> [mg/m ³]	rechnerische Geruchsschwelle obere Grenze des 95% Konfidenzintervalls [mg/m ³]	Weber-Fechner- Koeffizient	Korrelationskoeffi- zient mit „Duft“	Korrelationskoeffi- zient mit „Gestank“
Aceton	20,50	26,69	34,77	2,51	-0,19	+0,39
2-Ethyl- hexanol	0,098	0,127	0,166	2,23	+0,02	+0,29
Acetophenon	0,0059	0,0077	0,0100	2,83	+0,01	+0,25
Benzothiazol	0,0041	0,0054	0,0070	1,95	-0,47	+0,70
2-Phenoxy- ethanol	3,20	4,16	5,42	2,42	+0,70	-0,47
Butansäure	0,0008	0,0011	0,0014	2,27	-0,71	+0,84
Essigsäure	0,016	0,021	0,027	1,95	-0,26	0,48
Hexanal	0,0024	0,0031	0,0041	2,74	+0,87	-0,75
Nonanal	0,0021	0,0027	0,0035	2,99	+0,67	-0,50
m-Kresol	0,00022	0,00028	0,00036	2,28	-0,63	+0,74
Hexansäure	0,0122	0,0159	0,0208	2,56	-0,63	+0,83
p-Kresol	0,00028	0,00036	0,00047	2,10	-0,22	+0,49
2,4,6-Trichlor- anisol	0,000062	0,000080	0,000104	2,47	-0,29	+0,36
Naphthalin	0,0015	0,0019	0,0025	2,86	-0,77	+0,89
1-Methyl- naphthalin	0,0070	0,0092	0,0119	2,72	-0,75	+0,89
2-Methyl- naphthalin	0,0042	0,0055	0,0071	3,31	-0,72	+0,89
1,4-Dimethyl- naphthalin	0,0277	0,0361	0,0471	2,54	-0,76	+0,91
ε-Caprolactam	0,3065	0,3992	0,5199	3,04	-0,82	+0,87
Phenol	0,0372	0,0484	0,0630	3,40	-0,64	+0,73
2-Butanon- oxim	0,21	0,27	0,35	3,27	-0,68	+0,66

Summary

The first concept according the health-hygienic evaluation of odours in indoor air with odour guide values has been published by German Committee on Indoor Guide Values (AIR) in 2014 [Ad-hoc-AG, 2014]. The concept of odour guide values was tested until December 2015. After this testing period all comments and opinions submitted were evaluated. Currently AIR is preparing an appropriate revision of the evaluation scheme.

Simultaneously, deriving odour guide values was only possible for few substances due to few existing odour detection thresholds (ODT) of the substances of interest. For this reason, the odour detection threshold of 20 substances (overview see following table) shall be determined within this project. Additionally, the Weber-Fechner coefficients and the hedonic tone of each substance shall be determined. All these parameters will be taken into account for the new odour guide value concept.

Thus, the aim of the project is to determine the odour detection thresholds, the odour intensities applied mainly above the ODT and the hedonic tone for the 20 chosen substances in ambient air.

The results of the project will be considered in the new concept of AIR.

Overview 20 Substances

Register of the 20 substances of interest

Name of Substance	Name of Substance	Name of Substance	Name of Substance
Acetone	Butyric acid	Hexanoic acid	2-Methylnaphthalene
2-Ethylhexanol	Acetic acid	p-Cresol	1,4-Dimethylnaphthalene
Acetophenone	Hexanal	2,4,6-Trichloroanisole	ε-Caprolactam
Benzothiazole	Nonanal	Naphthalene	Phenol
2-Phenoxyethanol	m-Cresol	1-Methylnaphthalene	Methylethyl ketone oxime

For all substances investigated in the project the same procedure was chosen. Initially, preliminary tests were carried out to ensure the transfer of the substances into the gas phase by means of evaporation in a Liquid to Gas Vaporiser (LiGaVa) in the required concentration. For this purpose, substances that are present as solids at room temperature were first dissolved in a solvent that is as odourless as possible. The master bag (MB) produced in this way was used for further investigations for the project. By continuing to use the individual master bags from the preliminary tests, wall effects in the Nalophan® bags used should be reduced.

The panellists used are part of the Olfasense panel and are selected and trained according to DIN EN 13725. For the determination of the parameters odour concentration or odour threshold, odour intensity and hedonic odour tone, the assessments of 12 panellists are used.

The determination of the odour concentration and the conclusion on the odour threshold was carried out using a TO8s olfactometer in accordance with DIN EN 13725:2003 "Air quality - Determination of odour concentration by dynamic olfactometry". By definition, the reference substance is n-butanol (Cas No 71-36-3). An odour or n-butanol sample is presented to the panellists in decreasing dilution, i.e. with increasing concentration, alternating with neutral reference air. As soon as the panellists perceive the smell, they confirm this perception. 10 valid threshold estimates for the determination of the odorous substances are given by each panellist and the odorous substance concentration in GE_E/m^3 is determined as a geometric mean value.

The odour intensity is determined according to VDI 3882 Part 1 using the constant method. The objective of the intensity assessment was to present at least 2 sub-threshold and 6 supra-threshold intensities. After the performance, the olfactometer switches off and the panellists give their evaluation on a seven-level category scale from 0 (imperceptible) to 6 (extremely strong). From these intensity evaluations the so-called intensity characteristic curves can be plotted and the Weber-Fechner coefficients can be derived.

To determine the hedonics of the 20 substances, the method for determining the hedonic odour tone based on VDI 3940 Part 4 is used. A total of 3 polarity profiles are collected from each panellist: Fragrance, stench and odour of the substance. The evaluations of the panellists employed are averaged, multiplied by hedonic factor scores defined in VDI 3940 Part 4 and then plotted in a diagram. From the data obtained, the product-moment correlation coefficients according to Pearson can be derived for the concept's fragrance and stench in accordance with VDI 3940 Part 4.

For quality assurance, the concentration of the odorous substances was determined for the 20 substances at the nasal-olfactometer interface by GC-MS, if analytically possible. The results show no systematic errors. For the substances analysed, a plausibility check showed predominantly high agreement between calculated and analytically determined concentration. For some substances, analytically significantly lower concentrations were determined, so that it is recommended to take into account the low recovery rates of individual substances in the Nalophan® bag when calculating the odour threshold.

All the above parameters are listed in the following table. Odour threshold values are given on the basis of the concentrations determined by calculation. Based on the 95% confidence interval, according to DIN EN 13725, also the lower and upper limits of the ODTs are given.

Overview of determined parameters for the 20 substances of interest

Specification of the calculated concentration at the odour detection threshold (ODT) as an expected value and the lower and upper limits as a function of the 95% confidence interval; Weber-Fechner coefficient and correlation of the substance odour with the concepts “fragrance” and “stench”

Substance	ODT lower limit of the 95% confidence interval [mg/m ³]	ODT expectancy value [mg/m ³]	ODT upper limit of the 95% confidence interval [mg/m ³]	Weber-Fechner- coefficient	correlation coefficient for “fragrance”	correlation coefficient for “stench”
Acetone	20.50	26.69	34.77	2.51	-0.19	+0.39
2-Ethylhexanol	0.098	0.127	0.166	2.23	+0.02	+0.29
Acetophenone	0.0059	0.0077	0.0100	2.83	+0.01	+0.25
Benzothiazole	0.0041	0.0054	0.0070	1.95	-0.47	+0.70
2-Phenoxyethanol	3.20	4.16	5.42	2.42	+0.70	-0.47
Butyric acid	0.0008	0.0011	0.0014	2.27	-0.71	+0.84
Acetic acid	0.016	0.021	0.027	1.95	-0.26	0.48
Hexanal	0.0024	0.0031	0.0041	2.74	+0.87	-0.75
Nonanal	0.0021	0.0027	0.0035	2.99	+0.67	-0.50
m-Cresol	0.00022	0.00028	0.00036	2.28	-0.63	+0.74
Hexanoic acid	0.0122	0.0159	0.0208	2.56	-0.63	+0.83
p-Cresol	0.00028	0.00036	0.00047	2.10	-0.22	+0.49
2,4,6- Trichloroanisole	0.000062	0.000080	0.000104	2.47	-0.29	+0.36
Naphthalene	0.0015	0.0019	0.0025	2.86	-0.77	+0.89
1- Methylnaphthalene	0.0070	0.0092	0.0119	2.72	-0.75	+0.89
2- Methylnaphthalene	0.0042	0.0055	0.0071	3.31	-0.72	+0.89
1,4- Dimethylnaphthalene	0.0277	0.0361	0.0471	2.54	-0.76	+0.91
ε-Caprolactam	0.3065	0.3992	0.5199	3.04	-0.82	+0.87
Phenol	0.0372	0.0484	0.0630	3.40	-0.64	+0.73
Methylethyl ketone oxime	0.21	0.27	0.35	3.27	-0.68	+0.66

1 Hintergrund und Problemstellung

Der Ausschuss für Innenraumrichtwerte (AIR) veröffentlichte im Jahr 2014 ein erstes Konzept zur gesundheitlich-hygienischen Beurteilung von Geruchsstoffen in der Innenraumluft mittels Geruchsleitwerten (GLW) [Ad-hoc-AG, 2014]. Das GLW-Konzept befand sich bis Dezember 2015 in der Erprobungsphase. Nach Ablauf der Erprobungsphase wurden die eingegangenen Stellungnahmen ausgewertet. Der AIR bereitet derzeit eine entsprechende Überarbeitung des Bewertungsschemas vor. Gleichzeitig war die Ableitung von GLWs aufgrund der wenigen vorhandenen Geruchswahrnehmungsschwellen nur für wenige Stoffe möglich. Aus diesem Grund sollen im Rahmen des Projektes Geruchswahrnehmungsschwellen für 20 Substanzen ermittelt werden. Ebenso sollen die Weber-Fechner-Koeffizienten und die Hedonik der einzelnen Stoffe ermittelt werden. Diese Parameter können dann stoffspezifisch im neuen GLW-Konzept berücksichtigt werden.

2 Ziel und Gegenstand des Forschungsvorhabens

Das Ziel dieses Vorhabens ist die Bestimmung der Geruchswahrnehmungsschwellen, der Geruchsintensitäten im vornehmlich überschwelligen Bereich und der Hedonik für 20 ausgewählte Geruchsstoffe in der Luft. Die Ergebnisse des Projekts sollen in das neue Konzept des AIR einfließen.

Die Substanzen, die in diesem Projekt untersucht werden sollten, sind in der folgenden Tabelle 1 zusammengestellt.

Tabelle 1: Übersicht der 20 zu untersuchenden Substanzen

Liste der 20 zu untersuchenden Substanzen mit Cas.-Nr.

Substanz Name	Cas.-Nr.
Aceton	67-64-1
2-Ethylhexanol*	104-76-7
Acetophenon	98-86-2
Benzothiazol	95-16-9
2-Phenoxyethanol	122-99-6
Butansäure	107-92-6
Essigsäure	64-19-7
Hexanal	66-25-1
Nonanal	124-19-6
m-Kresol	108-39-4
Hexansäure	142-62-1
p-Kresol	106-44-5
2,4,6-Trichloranisol	87-40-1
Naphthalin	91-20-3
1-Methylnaphthalin	90-12-0
2-Methylnaphthalin	91-57-6
1,4-Dimethylnaphthalin	571-58-4
ε-Caprolactam	105-60-2
Phenol	108-95-2
2-Butanonoxim	96-29-7

*Racemat – 1:1 (R)- bzw. (S)-2-Ethylhexanol

3 Grundlagen

3.1 Prüf- und Messverfahren

3.1.1 Bestimmung der Geruchsstoffkonzentration / der Geruchsschwelle eines Geruchsstoffes in Anlehnung an DIN EN 13725

Die Bestimmung der Geruchsstoffkonzentration von gasförmigen Geruchspuren wird in der DIN EN 13725:2003 Luftqualität – Bestimmung der Geruchsstoffkonzentration mittels dynamischer Olfaktometrie beschrieben.

Bei dieser Methode wird eine Geruchspure definiert mit neutraler, geruchsfreier Luft verdünnt und einem Panel von Prüfern dargeboten. Ein Panel besteht mindestens aus 4 zugelassenen Geruchsprüfern. Diese Geruchsprüfer werden auf ihre Geruchsempfindlichkeit gegenüber n-Butanol am Olfaktometer gemäß DIN EN 13725 untersucht und selektiert. Vor jeder Messung werden die Eignungskriterien der Prüfer überprüft.

Ein Olfaktometer ist hier eine Verdünnungseinheit zur Darbietung der Geruchspuren und ist computergesteuert. In Abbildung 1 ist beispielhaft ein TO8-Olfaktometer mit einem Prüferpanel dargestellt. Dieses TO8-Olfaktometer deckt mit insgesamt 15 Verdünnungsstufen einen Verdünnungsbereich von etwa 1:4 bis 1:65.000 ab.

Abbildung 1: Geruchsbewertung an einem TO8-Olfaktometer



Geruchsbewertung mit 4 Prüfern an einem TO8-Olfaktometer

Quelle: Archiv der Olfasense GmbH

Als Referenzstoff für diese olfaktometrischen Messungen wird n-Butanol (Cas.-Nr. 71-36-3) verwendet. Entsprechend der DIN EN 13725:2003 wird angenommen, dass sich die Geruchsempfindlichkeit auf den Referenzstoff n-Butanol auch auf andere Geruchsstoffe bzw. -proben übertragen lässt.

Die Geruchs- oder n-Butanol-Probe wird den Prüfern in sinkender Verdünnung, d.h. mit zunehmender Konzentration, im Wechsel mit neutraler Referenzluft dargeboten. Die Verdünnung der Probenluft reduziert sich in jedem Schritt etwa um den Faktor 2 zur jeweils vorherigen Stufe. Die Prüfer werden während des gesamten Prozesses gefragt, ob sie einen Geruch wahrnehmen können. Sobald sie etwas riechen ist ein Handtaster zu betätigen. Außerdem werden in zufälliger Reihenfolge statt verdünnter Probenluft neutrale Nulllüfte eingestreut.

Das Ergebnis eines solchen Durchgangs ist die individuelle Schwellenschätzung für jeden Prüfer und wird mit Z_{ITE} abgekürzt. Der Z_{ITE} -Wert ist dabei das Produkt aus der letzten Verdünnung, bei der ein Prüfer noch keine Wahrnehmung hatte und der ersten Verdünnung, ab der ein Prüfer konsequent eine Geruchswahrnehmung bestätigt. Dieser Z_{ITE} -Wert entspricht damit statistisch der Verdünnung zwischen gerade wahrgenommener Probe und der gerade nicht wahrgenommenen Probe.

$$Z_{ITE} = \sqrt{(D_n \cdot D_j)} \quad (1)$$

mit:

- Z_{ITE} einzelne Schwellenschätzung eines Prüfers, dargestellt als Verdünnungsfaktor
- D_n letzte Verdünnung, bei der ein Prüfer noch keine Geruchswahrnehmung hatte
- D_j erste Verdünnung, ab der ein Prüfer konsequent eine Geruchswahrnehmung bestätigt

Um zum Ergebnis einer Messung zu gelangen wird zunächst von allen Prüfern (meist 4) und allen Durchgängen (jeder Durchgang enthält je eine Schwellenschätzung jedes Prüfers) der geometrische Mittelwert der einzelnen Z_{ITE} -Werte berechnet.

$$\bar{Z}_{ITE} = \sqrt[n]{\prod_{i=1}^n Z_{ITE,i}} \quad (2)$$

mit:

- $\bar{Z}_{ITE}$ Geruchsschwelle des Teams
- n Anzahl ermittelter individueller Schwellenschätzungen

Innerhalb einer Messung darf eine gewisse Streuung nicht überschritten werden. Diese wird als ΔZ in jedem Prüfprotokoll angegeben. Entsprechend DIN EN 13725 muss innerhalb einer Messung jederzeit $|\Delta Z| \leq 5$ eingehalten werden. Werte, die mehr als Faktor $\Delta Z > 5$ vom Mittelwert streuen, müssen eliminiert werden. Damit verbleiben solche Z_{ITE} -Werte bzw.

Prüferantworten in einer Messung, die nach nachträglicher Auslese für gültig befunden werden. Dieser geometrische Mittelwert wird $\bar{Z}_{ITE,pan}$ genannt.

Die Einheit der dynamischen Olfaktometrie ist GE_E/m^3 . Per Definition ist $1 GE_E/m^3$ identisch mit der n-Butanol-Konzentration von $123 \mu g/m^3$ bzw. mit dem Geruch, der von $123 \mu g$ n-Butanol in einem Kubikmeter Luft verursacht wird. Daraus resultiert, dass die Geruchsstoffkonzentration einer untersuchten Probe als geometrisches Mittel aller Schwellenschätzungen (Z_{ITE} -Werte) multipliziert mit $1 GE_E/m^3$ dargestellt wird [DIN EN 13725:2003].

Die eigentliche Geruchsstoffkonzentration c_{OD} wird nun wie folgt berechnet:

$$c_{OD} = \bar{Z}_{ITE,pan} \cdot 1 \frac{GE_E}{m^3} \quad (3)$$

c_{OD}	Geruchsstoffkonzentration einer Geruchsprobe
$\bar{Z}_{ITE,pan}$	geometrisches Mittel von Z_{ITE} aller nach nachträglicher Auslese für gültig befundenen Prüferantworten in einer Messung

Der panelübergreifende Verdünnungsfaktor einer untersuchten Probe ist damit das geometrische Mittel aller Z_{ITE} -Werte. Normativ sind mindestens 8 Z_{ITE} -Werte notwendig.

Die Norm fordert weiterhin die Einhaltung statistischer Anforderungen. Hierzu zählen die Genauigkeit (A_{od}) und Präzision (r) unter Wiederholbedingungen des gesamten Teams. Die Genauigkeit umfasst sowohl die Richtigkeit (dargestellt als systematische Abweichungskomponente des Messverfahrens, Bias), als auch die Präzision (zufällige Messabweichung, Zufallsfehler). Die Prüfvariable für die Genauigkeit ist A_{od} . Dabei muss $A_{od} \leq 0,217$ sein. Neben dem Gesamtkriterium für Genauigkeit muss die Präzision, dargestellt als Wiederholpräzision, zusätzlich die Bedingung $r \leq 0,477$ erfüllen.

Weiterhin stellt die DIN EN 13725 als Anforderungen für die Bewertung von n-Butanol, dass die individuelle Empfindlichkeit ($10^{\bar{y}_{ITE}}$) der Prüfer in einem Bereich zwischen 20 – 80 ppb und die individuelle maximale Standardabweichung ($10^{S_{ITE}}$) unterhalb von 2,3 liegen muss.

Zur Berechnung werden mindesten 10 einzelne Schwellenschätzung von n-Butanol benötigt. Zunächst werden aus den Schwellenschätzungen die einzelnen Geruchsschwellen errechnet. Aus den dann logarithmierten Werten (y_{ITE}) wird das arithmetische Mittel $\bar{y}_{ITE}$ berechnet. Aus diesen Daten berechnet sich die individuelle maximale Standardabweichung wie folgt:

$$S_{ITE} = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (y_{ITE,i} - \bar{y}_{ITE})^2}{n - 1}} \quad (4)$$

S_{ITE}	individuelle maximale Standardabweichung logarithmisch
$y_{ITE,i}$	Wert des Prüfergebnisses i
$\bar{y}_{ITE}$	Mittelwert der einzelnen Schwellenschätzungen

Alle Anforderungen werden regelmäßig überprüft. Jeder einzelne Prüfer muss sowohl im Mittelwert innerhalb eines vorgegebenen Empfindlichkeitsfensters liegen als auch eine maximale Streuung nicht überschreiten. Erfüllt ein Prüfer diese Voraussetzungen nicht mehr, wird er vom Panel ausgeschlossen.

Die Qualitätssicherung dieser Messmethode wird gemäß ISO 17025 sichergestellt. Die Olfasense Labore sind diesbezüglich akkreditiert.

3.1.2 Bestimmung der Geruchsintensität eines Geruchsstoffes und des Weber-Fechner-Koeffizienten (k_w) gemäß VDI 3882 Blatt 1

Die Bestimmung der Geruchsintensität erfolgt entsprechend VDI 3882 Blatt 1 nach dem Konstanzverfahren, bei dem die Reihenfolge der dargebotenen Intensitäten zufällig festgelegt wird. Jede Konzentration wird drei Mal im Wechsel mit neutraler Referenzluft dargeboten.

Die Bewertung jeder Konzentration bzw. Intensitätsstufe erfolgt anhand der Kategorienskalierung in Tabelle 2.

Tabelle 2: Kategorienskalierung zur Beurteilung der Geruchsintensität nach VDI 3882 Blatt 1

Geruch	Intensitätsstufe
extrem stark	6
sehr stark	5
stark	4
deutlich	3
schwach	2
sehr schwach	1
nicht wahrnehmbar	0

Diese Kategorienskala ist eine Ordinalskala, deren Klassen in einer definierten Rangreihe geordnet sind:

nicht wahrnehmbar < sehr schwach < schwach < deutlich < stark < sehr stark < extrem stark

Für die einzelnen Verdünnungsstufen werden die Häufigkeitsverteilungen der Prüferantworten für $I=0$ bis $I=6$ ermittelt und anschließend die Zahlen für die Überschreitung einzelner Intensitätsstufen für $I>0$ bis $I>5$ bestimmt. Für jede einzelne Intensitätsstufe werden diese Häufigkeitsverteilungen als prozentuale Intensitätsüberschreitungen über der logarithmierten Verdünnungszahl der dargebotenen Geruchsprobe dargestellt.

„Die Häufigkeit der Intensitätsschätzungen [wird] oberhalb der betrachteten Intensitätskategorie $I=I_s$ [...] über dem Logarithmus der Verdünnungszahlen aufgetragen. Aus den S-Kurven können für $I_s=0, 1, 2$ und 3 die Werte für Z_{16} , $Z_{50}=\hat{Z}$ und Z_{84} entnommen werden.“ [VDI 3882 Blatt 1].

„Die Intensitätsübergänge $I=I_s+0,5$ [werden] über den Logarithmus der Verdünnungszahlen der 50-Perzentile $\hat{Z}$ der Intensitätsstufen $I_s=1$ bis 6 aufgetragen. Die Gerade bestätigt das Weber-Fechner Gesetz“ [VDI 3882 Blatt 1].

Die Steigung dieser Intensitätskennlinie entspricht somit dem Weber-Fechner-Koeffizienten k_w . Durch Ermittlung der Geruchsschwelle (vgl. Kapitel 3.1.1) und des Weber-Fechner-Koeffizienten, lässt sich das Weber-Fechner-Gesetz in der folgenden Form ableiten:

$$I = k_w \cdot \log\left(\frac{c_G}{\hat{c}_G}\right) = k_w \cdot \log\left(\frac{c_R}{c_{GS}}\right) \quad (5)$$

mit:

- I Intensität
- k_w Weber-Fechner-Koeffizient
- c_G Geruchsstoffkonzentration der Riechprobe, Vergleichsreiz
- $\hat{c}_G$ Geruchsschwelle, Bezugsreiz
- c_R Substanzkonzentration der Riechprobe
- c_{GS} Substanzkonzentration an der Geruchsschwelle

3.1.3 Bestimmung der hedonischen Geruchswirkung in Anlehnung an VDI 3940 Blatt 4

In der VDI 3940 Blatt 4 wird die Ermittlung der hedonischen Geruchswirkung mithilfe sogenannter Polaritätenprofile beschrieben. Das Verfahren dient dazu „Anhaltspunkte für die Abschätzung der Belästigungswirkung“ [VDI 3940-4] eines Geruches zu erhalten und seinen Charakter ggf. eindeutig als Duft oder Gestank zu klassifizieren.

Die Geruchsprüfer erhalten zur Bewertung eines Geruches einen Bogen, auf dem 29 gegensätzliche Wortpaare abgebildet sind (z.B. „stark“ & „schwach“; „aktiv“ & „passiv“; „grob“ & „fein“ usw.). Ein beispielhafter Auszug aus der VDI 3940-4 findet sich in der folgenden Abbildung 2.

Abbildung 2: Auszug aus einem Polaritätenprofil

1.	stark	3	2	1	0	1	2	3	schwach
2.	grob	3	2	1	0	1	2	3	fein
3.	niederdrückend	3	2	1	0	1	2	3	erhebend
4.	robust	3	2	1	0	1	2	3	zart

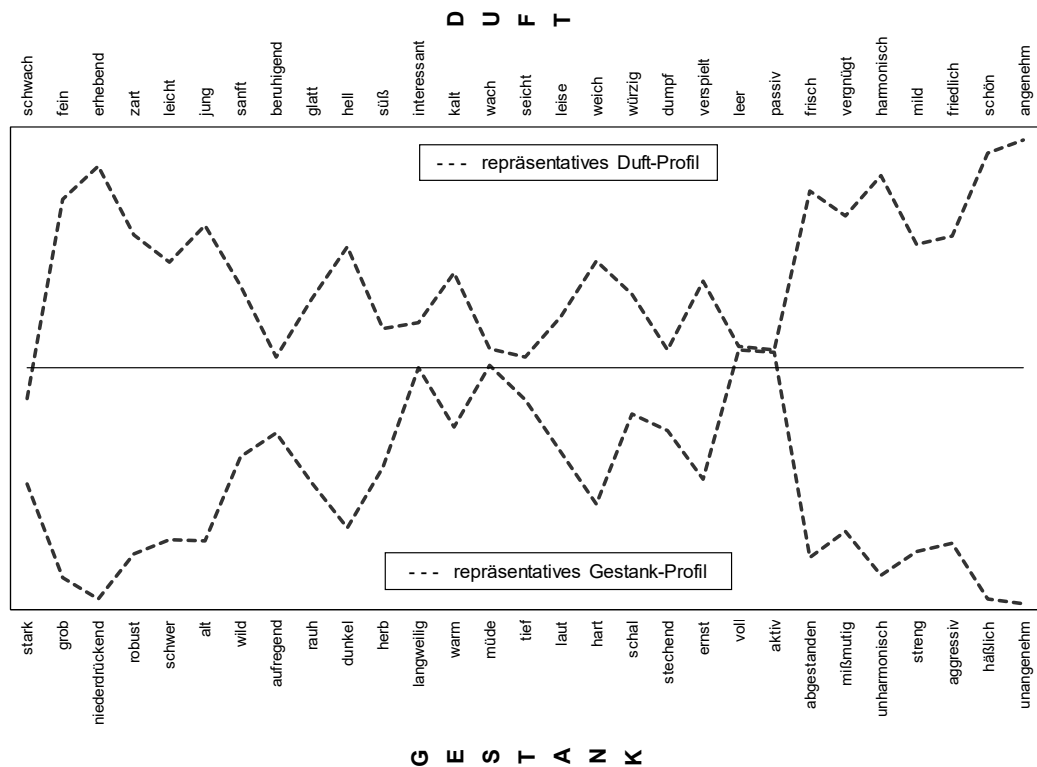
Quelle: VDI 3940 Blatt 4

Um zu überprüfen, ob Geruchsprüfer fähig sind die Bewertung mittels Polaritätenprofilen durchzuführen, werden von jedem Prüfer zunächst Polaritätenprofile für die allgemeinen Konzepte „Duft“ und „Gestank“ ausgefüllt. Geeignet sind demnach Prüfer, die für das Konzept „Gestank“ die Adjektive „niederdrückend“, „abgestanden“, „missmutig“, „unharmonisch“, „hässlich“ und „unangenehm“ mit einem Wert zwischen 1 und 3 markiert haben. Für das Konzept „Duft“ müssen zumindest die Adjektive „erhebend“, „frisch“, „vergnügt“, „harmonisch“, „schön“ und „angenehm“ zwischen 1 und 3 markiert werden.

Die Bewertungen eingesetzter Prüfer werden gemittelt, mit in der VDI 3940 Blatt 4 definierten Hedonik-Faktor-Scores multipliziert und anschließend in einem Diagramm aufgetragen.

Die repräsentativen Profile für Gestank und Duft sind in der folgenden Abbildung 3 dargestellt.

Abbildung 3: Repräsentative Polaritätenprofile für Duft und Gestank [VDI 3940 Blatt 4]



Quelle: VDI 3940 Blatt 4 – GIRL-Profil-Auswertungsschema

Aus den ermittelten Daten lassen sich entsprechend VDI 3940 Blatt 4 die Produkt-Moment-Korrelationskoeffizienten nach Pearson für die Konzepte Duft und Gestank ableiten.

Ein Wert von 0,00 bedeutet, dass keine Korrelation vorliegt und somit keine Ähnlichkeit mit dem betrachteten Geruchskonzept (Gestank oder Duft). Ein Wert von -1,00 zeigt an, dass keine Ähnlichkeit mit dem betrachteten Konzept besteht, während ein Wert von +1,00 eine maximal positive Korrelation mit dem betrachteten Konzept widerspiegelt.

3.1.4 Qualitative und quantitative Bestimmung der Substanzkonzentrationen mittels FID, GC-MS und GC-IMS

3.1.4.1 FID

Der Flammenionisationsdetektor (FID) RS55-T der Firma Ratfisch ist ein kontinuierlich betriebener FID, der mit einem Gemisch aus Wasserstoff und Helium (40:60) betrieben und mit Propan in Stickstoff (90ppm) kalibriert wird. Das zu prüfende Gas wird thermisch ionisiert. Die freiwerdenden Elektronen werden eingefangen und erzeugen das Messsignal.

Die Messergebnisse werden als Volumenkonzentration in ppm ausgegeben. Für die Umrechnung gemessener Konzentrationen stehen basierend auf der Kalibrierung mit propanhaltigem Prüfgas Faktoren des Herstellers zur Verfügung, sodass der FID beispielsweise für die Quantifizierung von Aceton eingesetzt werden kann.

Die Probe wird dem FID gasförmig zugeführt.

3.1.4.2 GC-MS

Die Verwendung der Gaschromatographie (GC), verbunden mit einem massenspektrometrischen Detektor (MS; hier: ISQ 7000, Thermo Fisher Scientific), ist ein gängiges Verfahren zur Analyse flüchtiger organischen Verbindungen (VOC – volatile organic compounds). Die Proben werden zunächst auf Tenax®-Tubes sorbiert. Anschließend werden die Proben der GC (hier: TRACE 1310, Thermo Fisher Scientific) mittels dieser Tenax®-Tubes zugeführt. Die Substanzen werden mithilfe von Thermodesorption (TDS; hier: Unity2-xr Markes International, UK) vom Tenax®-Tube desorbiert (280-330 °C) und mittels einer thermoelektrischen Kühlfalle (0-10 °C) fokussiert. Anschließend wird die Kühlfalle gemäß eines programmierten und optimierten Temperaturprofils auf 300-350 °C erhitzt, um alle flüchtigen Bestandteile bis zum Einlass der GC-Säule über eine Transferleitung für die anschließende chromatographische Trennung freizusetzen. Am Ende der GC-Säule gelangen die Verbindungen nach der Trennung mit unterschiedlichen (Retentions-)Zeiten (ausgedrückt in Minuten) in die MS, wo sie fragmentiert und anschließend durch die NIST 2017-Spektrendatenbank¹ auf der Grundlage der Fragmentierungsmuster jedes Moleküls identifiziert werden.

Merkmale der Identifizierung sind zum einen die Retentionszeit und zum anderen die Fragment-Ionen. Die Retentionszeit ist abhängig von der Flüchtigkeit der Substanz. Für die Fragmentierung ist es wichtig, dass die Substanz in die Gasphase überführt wird. Erst dann kann sie fragmentiert und die Fragmente dann mittels MS detektiert werden. Je vollständiger/zerstörungsfreier der Analyt in die Gasphase überführt wird, um so nachweisstärker ist das Verfahren.

Die Gaschromatographie gekoppelt an ein Massenspektrometer stellt eine nachweisstarke Analysentechnik zur quantitativen Bestimmung von flüchtigen Verbindungen dar. Insbesondere über die direkte Kalibrierung mit flüssigen Standards eignet sie sich für die quantitative Substanzanalyse.

Bezüglich der Referenzsubstanz TD8 kann das verwendete TD-GC-MS-System Substanzen von 0,01 bis 1 ng nachweisen. Abhängig von der verwendeten Probenahmemethode kann dieser Wert 0,1 bis 0,5 µg/m³ entsprechen.

3.1.4.3 GC-IMS

Die GC-IMS ist eine Kombination aus Gaschromatografie (GC) und Ionenmobilitätsspektrometrie (IMS). Über die GC findet eine Trennung durch Adsorptions- und Verteilungsprozesse statt. In der IMS findet eine weitere Trennung der zuvor ionisierten Verbindungen in Abhängigkeit der Driftzeit durch eine Driftröhre in einem definierten elektrischen Feld statt. Die Ionisierung erfolgt als Photo-Ionisation mittels einer 10,6 eV UV-Lampe (oder eine strahlungsarme Tritium (H₃)-Quelle). Durch dieses Verfahren ist es möglich, Isomere einzelner Substanzen abzubilden, sodass in der Regel sowohl die Monomere als auch die Dimere einer Verbindung abgebildet werden.

Aufgrund der zweidimensionalen Trennung durch die GC-IMS ergeben sich aus den Messungen sogenannte topografische Darstellungen der ermittelten Peaks. Dies ermöglicht beispielsweise den Vergleich mit einer Referenzprobe. Da Messergebnisse mit der GC-IMS in wenigen Minuten

¹ <https://www.nist.gov/srd/nist-standard-reference-database-1a-v17>

generiert werden können, kann dieses Verfahren zur schnellen Überprüfung und zur Qualitätssicherung bezüglich Veränderungen zu einer Referenz eingesetzt werden.

3.2 Praxisanwendung

3.2.1 Probenaufbereitung und Konzentrationsberechnung

Die 20 Substanzen, die im Zuge dieses Forschungsprojektes untersucht wurden, lagen überwiegend als Flüssigkeiten vor. Zur Überführung dieser Stoffe in die Gasphase wurde ein Liquid to Gas Vaporiser (LiGaVa) eingesetzt, der mit gereinigter Druckluft (Aufbereitung über Silikagel, Aktivkohle und Filterwatte) beschickt wurde. Um auch Feststoffe definiert in die Gasphase zu überführen, wurden diese zunächst in einem geeigneten, möglichst geruchsneutralen Lösungsmittel gelöst und anschließend ebenfalls verdampft. Die im LiGaVa eingestellte Temperatur lag grundsätzlich oberhalb des Siedepunktes des betreffenden Stoffes. Die Injektionen wurden mit einer 100 µL Spritze (ILS-Spritze 100µl H FN/0,72/c/51) vorgenommen. Um sicherzustellen, dass keine Substanzreste im LiGaVa verbleiben wurde nach jeder Aufbereitung ein Geruchstest am LiGaVa vorgenommen. Um Wandeffekte in den verwendeten Nalophan®-Beuteln zu minimieren wurde je Substanz nach Möglichkeit ein Beutel verwendet, der zunächst für Vorversuche und anschließend für die letztendliche Bewertung mit Geruchsprüfern eingesetzt wurde.

Um die Sicherheit der Geruchsprüfer zu gewährleisten, wurden die Substanzen so aufbereitet, dass in der geringsten am Olfaktometer einstellbaren Verdünnungsstufe die Arbeitsplatzgrenzwerte (AGW) nach TRGS 900 eingehalten werden. Für die Stoffe für die keine AGWs vorliegen wurden Beurteilungswerte aus der GESTIS International Limit Values Datenbank einbezogen, die Arbeitsplatzgrenzwerte aus unterschiedlichen Ländern darstellt.

Die Berechnung der Konzentrationen flüssig vorliegender Ausgangssubstanzen wurde unter Berücksichtigung der Substanzreinheit wie folgt vorgenommen. Zunächst wurde die injizierte Substanzmasse anhand des injizierten Volumens, der Substanzdichte und der Substanzreinheit entsprechend Formel (6) berechnet.

$$m_S = V_S \cdot \rho_S \cdot \frac{R_S}{100} \quad (6)$$

Anschließend wurde über die injizierte Substanzmasse und das Beutelvolumen die rechnerische Substanzkonzentration im Mutterbeutel entsprechend Formel (7) ermittelt.

$$c_S = \frac{m_S \cdot 10^3}{V_B} \quad (7)$$

mit:

m_S	injizierte Substanzmasse	in g
V_S	injiziertes Substanzvolumen	in mL
ρ_S	Dichte	in g/mL
R_S	Reinheit	in %
c_S	Konzentration der Substanz im Beutel	in mg/m ³
V_B	Beutelvolumen	in m ³

Stoffe, die unter Raumbedingungen in festem Zustand vorlagen, wurden zunächst in einem geeigneten Lösungsmittel gelöst. Hierfür wurden je nach Substanzeigenschaften H₂O oder Isopropanol verwendet. Vorversuche zeigten, dass die maximal in den generierten Proben verdampfte Menge an Isopropanol in einen Nalophan®-Beutel keine Geruchswirkung aufweist.

Zunächst wurde hierfür nach Formel (8) die Menge der eingesetzten Substanz im Verhältnis zum Lösungsmittelvolumen berechnet:

$$c_{S,L} = \frac{m_{S,L}}{V_L} \quad (8)$$

Die resultierende Substanzmenge im Beutel wurde anschließend entsprechend Formel (9) berechnet:

$$c_s = \frac{V_s \cdot c_{S,L}}{V_B} \quad (9)$$

mit:

$c_{S,L}$	Konzentration der Substanz im Lösungsmittel	in mg/mL bzw. µg/µL
$m_{S,L}$	gelöste Masse der Substanz	in mg
V_L	Volumen des Lösungsmittels	in mL

Die 20 Substanzen sind mit Cas.-Nummer, physikalischen Parametern, einem Kurzzeit-Grenzwert sowie der Substanzreinheit in der folgenden Tabelle 3 zusammengestellt. Für Stoffe, die vom Hersteller mit „analytical standard“ angegeben sind, wird eine Reinheit von 100% angenommen.

Tabelle 3: Parameter der 20 zu untersuchenden Substanzen

Übersicht zum Hersteller/Lieferanten, Aggregatzustand bei Raumtemperatur, zu Siedepunkt und Dichte sowie zur Reinheit verwendeter Substanzstandards

Substanz Name	Cas.-Nr.	Aggregat- zustand bei Raum- temperatur	Siede- punkt [°C]	Dichte [g/cm ³]	Reinheit Standard [%]
Aceton ¹⁾	67-64-1	flüssig	56	0,79	95
2-Ethylhexanol ²⁾	104-76-7	flüssig	182	0,83	≥ 99,6
Acetophenon ²⁾	98-86-2	flüssig	202	1,03	a. s.
Benzothiazol ²⁾	95-16-9	flüssig	230	1,246	96
2-Phenoxyethanol ³⁾	122-99-6	flüssig	242	1,11	≥ 99
Butansäure ³⁾	107-92-6	flüssig	163	0,96	≥ 99
Essigsäure ³⁾	64-19-7	flüssig	118	1,05	≥ 99
Hexanal ²⁾	66-25-1	flüssig	129	0,81	98
Nonanal ²⁾	124-19-6	flüssig	195	0,83	95
m-Kresol ³⁾	108-39-4	flüssig	203	1,03	≥ 99
Hexansäure ³⁾	142-62-1	flüssig	206	0,93	≥ 98
p-Kresol ²⁾	106-44-5	fest	202	1,03	a. s.
2,4,6-Trichloranisol ²⁾	87-40-1	fest	235-238*	1,64**	99
Naphthalin ³⁾	91-20-3	fest	218	1,14	≥ 99
1-Methylnaphthalin ²⁾	90-12-0	flüssig	245	1,02	95
2-Methylnaphthalin ²⁾	91-57-6	fest	241	1,006	a. s.
1,4-Dimethylnaphthalin ²⁾	571-58-4	flüssig	262-264**	1,016**	95
ε-Caprolactam ²⁾	105-60-2	fest	270	1,02	99
Phenol ²⁾	108-95-2	fest	182	1,07	≥ 99
2-Butanonoxim ²⁾	96-29-7	flüssig	152	0,92	99

a. s. analytical standard

Hersteller: 1) Walter CMP, Kiel 2) Aldrich / Sigma-Aldrich, Taufkirchen 3) Carl Roth, Karlsruhe

physikalische Parameter stammen von: [IFA:2019b]

* [VWR:2019] | ** [Sigma Aldrich:2019]

3.2.2 Prüferkollektiv, Prüfereignung und Messort

Anzahl Prüfer: 12 (aufgeteilt auf 3 Teams)

Messort: Labor der Olfasense GmbH

Prüfer: Prüfer aus dem Olfasense Prüferkollektiv (identifizierbar über individuelle Kürzel)

Die eingesetzten Prüfer sind Bestandteil des Olfasense Prüferkollektivs und nach DIN EN 13725 selektiert und trainiert. Jeder Prüfer durfte an jeder Substanzbewertung nur einmal teilnehmen, um sicherzustellen, dass jeweils Daten von 12 unterschiedlichen Prüfern generiert wurden.

Die Geruchsempfindlichkeiten einzelner Prüfer für n-Butanol sind in den entsprechenden Substanzkapiteln zusammengestellt und entsprechen den Anforderungen der DIN EN 13725 (vgl. Kapitel 3.1.1).

Die Geruchsempfindlichkeiten jedes Teams sind zum Nachweis der Normkonformität ebenfalls in den entsprechenden Kapiteln aufgeführt.

3.2.3 Konzentrationsbestimmung mittels FID, GC-MS und GC-IMS

Für Aceton wurde eine quantitative Bestimmung der Aceton-Konzentration mittels FID vorgenommen. Für alle weiteren Substanzen wurden GC-MS-Messungen durchgeführt. Für 2-Phenoxyethanol, Butansäure, Essigsäure, Hexansäure und 2-Butanonoxim konnte keine hinreichende Kalibrierung mit dem verwendeten GC-MS-System erreicht werden, sodass diese Stoffe halbquantitativ mittels GC-IMS vermessen wurden, um Rückschlüsse auf deren Stabilität im Nalophan®-Beutel zu ziehen. Für 2,4,6-Trichloranisol wurden trotz hinreichender GC-MS-Kalibrierung GC-IMS Messungen durchgeführt, da die Probenmessungen unterhalb der Bestimmungsgrenze lagen und somit nicht ausquantifizierbar waren.

3.2.3.1 FID

Vor jeder Verwendung wurde der FID mittels Propan-Prüfgas kalibriert (siehe Kapitel 3.1.4.1). Für die Probenahme des Aceton-Luft-Gemisches wurde der Probenahmeschlauch des FID direkt mittig im Trichter des Olfaktometers platziert, um die Position der Nase bestmöglich abzubilden. Die Probe wurde dem FID kontinuierlich zugeführt und jeweils ein Mittelwert über 60 Sekunden gebildet.

3.2.3.2 GC-MS

Die Probenahme für die GC-MS-Messungen wurde durch Sorption der Proben auf Tenax®-Tubes mithilfe einer GilAir-Probenahmepumpe vorgenommen. Der Probenahmestrom betrug jeweils 100 mL/min. Um die Substanzkonzentrationen zu quantifizieren, wurden für jede der 20 Substanzen eine substanzspezifische Kalibrierkurve erstellt. Dafür wurden dieselben Standards verwendet, die auch für die Substanzaufbereitung zur Olfaktometrie eingesetzt wurden. Für solche Substanzen, die unter Raumbedingungen als Feststoffe vorliegen, wurden zusätzliche, bereits gelöste Standards bezogen. Eine Übersicht der verwendeten Standards und der zugrundeliegenden Lösungsmittel ist der folgenden Tabelle 4 zu entnehmen.

Tabelle 4: Übersicht verwendeter Standards für die GC-MS Kalibrierung als Feststoffe vorliegender Substanzen

Zusätzliche Standards, die zur Kalibrierung der GC-MS eingesetzt wurden, um Substanzen, die bei Raumtemperatur als Feststoffe vorliegen, ebenfalls bestmöglich mittels GC-MS abbilden zu können

Substanz Name	Cas.-Nr.	Hersteller des Standards	Lösungsmittel	Konzentration [µg/mL]
p-Kresol	106-44-5	Neochema	Methanol	100
2,4,6-Trichloranisol	87-40-1	Neochema	Methanol	100
Naphthalin	91-20-3	Neochema	Aceton	100
2-Methylnaphthalin	91-57-6	Neochema	Aceton	100
ε-Caprolactam	105-60-2	Neochema	Methanol	1000
Phenol	108-95-2	Neochema	Methanol	100

Die Probenahme auf Tenax®-Tubes wurde an einer Nasenmaske eines Olfaktometers bei einer definierten Verdünnung vorgenommen, sodass aus den Messergebnissen auf die analytische Konzentration im Mutterbeutel rückgeschlossen werden kann.

Nach Anschluss des Mutterbeutels an das verwendete Olfaktometer wurde für mindestens 10 Minuten die definierte Verdünnung dargeboten. Diese Verdünnungen sollten möglichst im Bereich der Geruchsschwelle liegen. Teilweise wurden sie geringer gewählt, um eine Probenahmezeit von 10 Minuten nicht deutlich zu überschreiten.

Bereits die erste durchgeführte Probenahme für Aceton zeigte, dass das Olfaktometer und insbesondere der verwendete Probenahmeport nach der Darbietung des, vergleichsweise flüchtigen, Acetons für mehrere Stunden gespült und ausgeheizt werden musste, ehe eine Fortführung der Geruchsbewertung mit Prüfern möglich war. Da Aceton der mit Abstand flüchtigste der 20 ausgewählten Stoffe ist, ist davon auszugehen, dass dieses Problem bei kontinuierlicher Darbietung über mehrere Minuten für schwerer flüchtige Stoffe noch deutlicher auftritt. Im Gegensatz zur kontinuierlichen Darbietung über mehrere Minuten, konnte beim üblichen Gebrauch des Olfaktometers, bei dem Proben jeweils für nur 2,2 Sekunden am Stück angeboten werden, keine Kontamination des Olfatometers festgestellt werden.

Aus diesem Grund wurde die Verdünnung der Substanzen für die kontinuierliche Darbietung zur Probenahme an einem weiteren Olfaktometer mit gleichem Aufbau und Funktionsprinzip vorgenommen und dort die Probenahme auf Tenax® durchgeführt.

Quantifizierung:

Für jede der 20 Substanzen wurde eine substanzspezifische Kalibrierung durchgeführt, die aus mindestens 5 Kalibrierpunkten bestand, die ebenfalls in je 3 Triplikaten vermessen wurden (siehe Abbildung 4).

Qualitätsparameter der Methode:

Vor Beginn der Analysesequenz wurden zwei Blank-Tubes vermessen. Die von diesen Blanks erzeugten Signale werden von den nachfolgenden Proben subtrahiert, um mögliche Quantifizierungsfehler durch Spurenverbindungen in den sauberen Röhrchen auszuschließen.

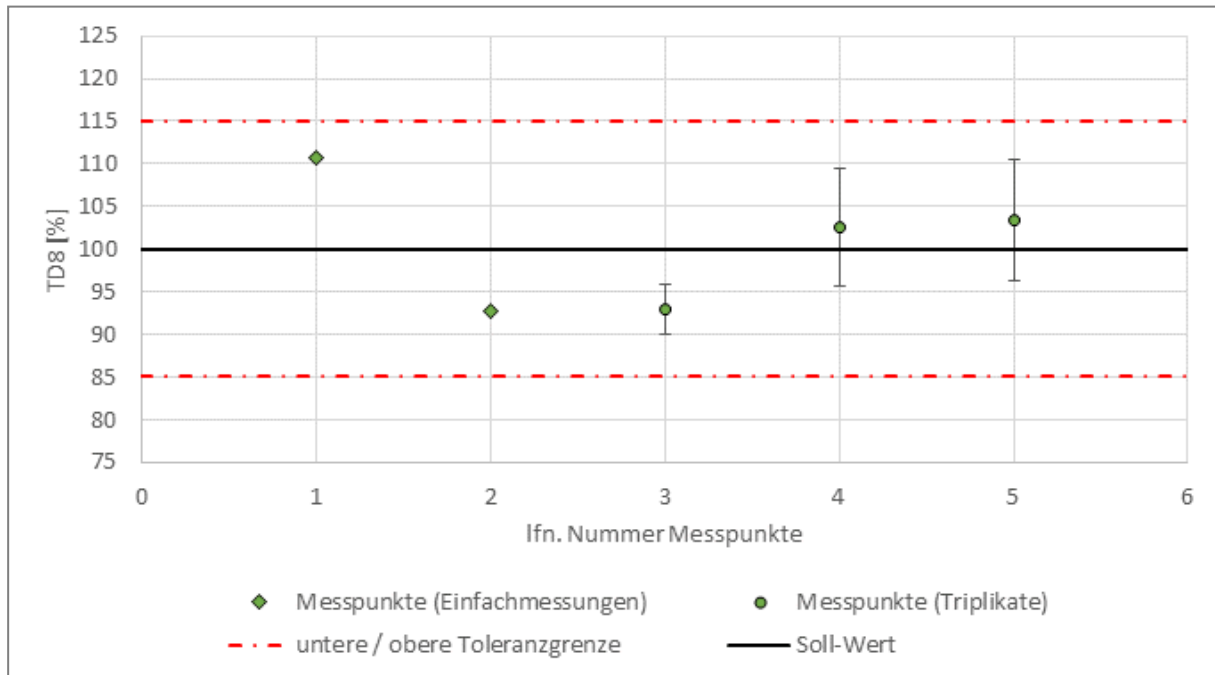
Die Nachweisgrenzen hängen von der chemischen Beschaffenheit der Verbindung sowie von der verwendeten Probenahme- und instrumentellen Methode ab.

Chemische Identifikationen erfolgen durch die Software GC-Analyzer, die alle detektierten Fragment-Ionen vergleicht, um die Erkennung sehr kleiner Unterschiede zu ermöglichen, die entweder frei von Interferenzen oder unter großen Peaks vergraben sind.

Die Identifizierung wird auch überprüft, indem die detektierten Peaks in Replikaten oder ähnlichen Proben mit derselben Retentionszeit oder demselben Retentionsindex (RI) verglichen werden. In komplexen Fällen (niedrige/gesättigte oder überlappende Signale) wird eine manuelle Überprüfung durchgeführt, wobei auch die Olfasense-eigene Datenbank Verwendung findet. Die relative Standardabweichung der mit dieser Methode erhaltenen Werte liegt unter 15%. Die Präzision zwischen einzelnen beispielhaften Messtagen wurde anhand der Referenzsubstanz TD8 überprüft und beträgt 8% (vgl. Abbildung 4).

Lagen einzelne Messwerte sowohl der Kalibrierung als auch der Probenmessung unterhalb der Bestimmungsgrenze oder wiesen ein Signal-Rausch-Verhältnis kleiner als 10 auf, konnten diese nicht hinreichend quantifiziert werden und wurden aus der Betrachtung herausgenommen.

Abbildung 4: Nachweis der Methodenpräzision mittels Referenzsubstanz TD8 (Angaben prozentual zum Sollwert)



Angabe der oberen und unteren Toleranzgrenze ($\pm 15\%$ vom Soll-Wert), des Sollwertes und der TD8-Messpunkte. Rauten entsprechend dabei Einfachmessungen, Punkten liegen Triplikate zugrunde und sind in Verbindung mit Standardabweichungen angegeben.

Quelle: eigene Darstellung Olfasense GmbH

3.2.3.3 GC-IMS

Die Proben wurden der GC-IMS direkt aus einem Nalophan®-Beutel zugeführt. Dafür wurden die Proben vom Mutterbeutel definiert in einen weiteren Nalophan®-Beutel verdünnt und der GC-IMS daraus zugeführt. Teilweise wurden die Proben unverdünnt vermessen, um ein ausreichendes Signal zu generieren.

Die Messdauer betrug jeweils fünf Minuten und die Temperatur der GC-IMS wurde auf 80 °C eingestellt.

3.2.4 Erfassung und Auswertung der Geruchsbewertungen mit trainierten Prüfern

3.2.4.1 Allgemeiner Ablauf

Für die Darbietung der Probengemische wurden die zwei T08s-Olfaktometer mit den Seriennummern 8504 und 8507 verwendet. Beide Geräte sind gleicher Bauart.

Für die Bestimmung der Parameter Geruchsstoffkonzentration/Geruchsschwelle, Geruchsintensität und hedonische Geruchswirkung wurden die Bewertungen von jeweils 12 Prüfern verwendet. Die Geruchsschwelle wurde anhand von jeweils 10 Schwellenschätzungen je Prüfer bestimmt, während für die Intensität je Prüfer 3 Bewertungen zu ermitteln waren. Die Hedonik wurde anhand von Polaritätenprofilen erfasst, die von den Prüfern in Kenntnis des zu bewertenden Geruches bearbeitet wurden. Vor dem Beginn einer Prüfung wurden von jedem Prüfer Polaritätenprofile für die Konzepte „Duft“ und „Gestank“ ausgefüllt. Diese beiden Polaritätenprofile wurden von jedem Prüfer, die eindeutig über ihre Kürzel zu identifizieren sind, nur einmal ausgefüllt.

Um die Bestimmung aller Parameter möglichst effektiv und in Einklang mit den vorgegebenen Normen durchzuführen, wurden die Messungen grundsätzlich wie folgt durchgeführt:

1. Prüferbewertung der n-Butanol-Geruchsschwelle (3x Schwellenschätzung)
2. Prüferbewertung der Geruchsschwellenwerte (3x Schwellenschätzung)
3. *Pause (5 min)*
4. Prüferbewertung der Geruchsintensitäten (1x)
5. *Pause (15 min)*
6. Prüferbewertung der Geruchsschwellenwerte (4x Schwellenschätzung)
7. *Pause (5 min)*
8. Prüferbewertung der Geruchsintensität (1x)
9. *Pause (15 min) + Bewertung der substanzspezifischen Hedonik mit Polaritätenprofilen*
10. Prüferbewertung der Geruchsschwellenwerte (3x Schwellenschätzung)
11. *Pause (5min)*
12. Prüferbewertung der Geruchsintensitäten (1x)
13. Ende der Prüferbewertung

Dieses Vorgehen bietet den Vorteil, dass die Geruchsschwellenbestimmung und die Bewertung der Geruchsintensität zwar unabhängig voneinander, aber dennoch mit festen Teams aus je 4 Prüfern durchgeführt werden konnten. Weiterhin ist mit diesem Vorgehen sichergestellt, dass alle Normvorgaben (DIN EN 13725; VDI 3882-1; VDI 3940-4) eingehalten werden.

Unter Berücksichtigung der olfaktorischen Eigenschaften einzelner Substanzen ist eine Abweichung vom vorgenannten Vorgehen möglich und wird in den entsprechenden Kapiteln erläutert.

Zur Überprüfung der den Prüfern tatsächlich dargebotenen Substanzkonzentrationen wurden i.d.R. vor der n-Butanol-Bewertung (Punkt 1), während der Pause (Punkt 5 oder 9) und nach Abschluss der Substanzbewertung (Punkt 13) Probenahmen auf Tenax®-Tubes direkt an einer Nasenmaske eines baugleichen Olfaktometers vorgenommen (vgl. Kapitel 3.2.3.2). Je nach Luftverbrauch bei der Probenahme auf Tenax®-Tubes am Olfaktometer, wurden teilweise eigens für die Tenax®-Probenahme vorkonditionierte Beutel verwendet. Diese Beutel wurden identisch zu den Prüferbeuteln behandelt (Vorkonditionierung, Lagerzeiten etc.).

3.2.4.2 Geruchsstoffkonzentrationen/Geruchsschwellen

Vor der Bestimmung der Geruchsstoffkonzentration einzelner Substanzen wurden mit den jeweils 4 eingesetzten Prüfern mindestens 3 gültige n-Butanol Schwellenschätzungen ermittelt. Die Daten dieser Messungen wurden nach Abschluss der Messung als Protokolle von der verwendeten Olfaktometer-Software zusammengestellt und ermöglichen eine direkte Kontrolle der Einhaltung vorgegebener Anforderungen an einzelne Prüfer (individuelle Empfindlichkeit $20 \leq 10^{YTE} \leq 80$ und individuelle maximale Streuung $10^{SITE} \leq 2,3$) und an das Team (Präzision $r \leq 0,477$ und Genauigkeit $A \leq 0,217$) (vgl. Kapitel 3.1.1).

Die individuellen Prüferdaten werden in jedem Substanzkapitel mit Prüferkürzeln aufgeführt und die Erfüllung der Anforderungen mittels Häkchen ✓ markiert. Die Teamdaten werden ebenfalls mit Empfindlichkeit, Präzision, Genauigkeit und den jeweiligen Prüferkürzeln aufgeführt.

Die Gesamt-Geruchsstoffkonzentration aller Teams wird als geometrisches Mittel aller Einzelbewertungen wie folgt bestimmt:

Für jede Substanz ergeben sich 120 gültigen Schwellenschätzungen (12 Prüfer mit jeweils 10 Schwellenschätzungen). Diese werden geometrisch gemittelt und anschließend das 95 % Konfidenzintervall, unter Berücksichtigung der maximal zulässigen Standardabweichung von 0,1721 gemäß DIN EN 13725, ermittelt. Für das 95% Konfidenzintervall ergibt sich daraus für 9 Messungen (vgl. DIN EN 13725 Anhang G) folgender Wert:

$$2,0 \cdot \frac{s_r}{\sqrt{n}} = 2,0 \cdot \frac{0,1721}{\sqrt{9}} = 0,1148$$

mit:

s_r maximal zulässige Standardabweichung
n Anzahl Messungen

Daraus lassen sich der Erwartungswert sowie eine obere und eine untere Grenze (95%-Konfidenz) zulässiger Werte in GE_E/m^3 ableiten. Aufgrund des logarithmischen Verhaltens der Riechwahrnehmung weisen die obere und untere Grenze unterschiedliche Differenzen zum Erwartungswert auf. Der Erwartungswert wird der Bestimmung der Geruchsschwellenkonzentration zugrunde gelegt.

3.2.4.3 Intensitäten

Die Bestimmung der Geruchsintensität erfolgt entsprechend VDI 3882 Blatt 1 nach dem Konstanzverfahren, bei dem die Reihenfolge der dargebotenen Intensitäten zufällig festgelegt wird.

Ziel der Intensitätsbewertung ist es, jeweils mindestens 2 unterschwellige und 6 überschwellige Intensitäten darzubieten. Den Prüfern wird zunächst zwei- bis dreimal Neutralluft dargeboten. Anschließend wird ihnen dreimal die gleiche Intensitätsstufe im Wechsel mit neutraler Referenzluft dargeboten (vgl. Kapitel 3.1.2). Nach der Darbietung schaltet sich das Olfaktometer aus und die Prüfer geben ihre Bewertung auf einer Skala von 0 bis 6 an. Dieses Vorgehen wird für alle acht gewählten Intensitätsstufen durchgeführt. Zusätzlich zu den acht Intensitätsstufen werden zwei Nulllüfte eingestreut, die äquivalent zur Intensitätsbewertung je dreimal dargeboten und bewertet werden.

Da die Gerüche in diesem Vorhaben mit jeweils drei Teams bewertet werden, wird die Auswahl der Intensitätsstufen gezielt auf Basis der ermittelten Geruchsstoffkonzentration und deren Reihenfolge in der Darbietung zufällig im ersten Team (A) festgelegt, um sicherzustellen, dass für jede dargebotene Intensitätsstufe 12 Antworten generiert werden. Die erste Intensitätsstufe wird so gewählt, dass sie möglichst einen deutlichen Geruch aufweist.

Für die Teams B und C werden die gleichen Intensitätsstufen und die gleiche Reihenfolge wie in Team A verwendet. Unterschieden sich die Bewertungen der Teams B und C merklich vom Team A, wurden teils zusätzliche Intensitätsstufen angeboten. Für diese zusätzlichen Intensitätsstufen wurden folglich keine 12 Einzelbewertungen generiert.

Bei der Darbietung der Substanzen werden in der geringsten Verdünnung die zuvor ermittelten zulässigen Expositionsgrenzwerte (vgl. Kapitel 3.2.1) stets unterschritten, um eine Gefährdung der Prüfer auszuschließen.

Die Auswertung der Daten und die Ableitung des Weber-Fechner-Koeffizienten werden entsprechend Kapitel 3.1.2 vorgenommen.

3.2.4.4 Hedonik

Zur Ermittlung der Hedonik der 20 Substanzen wird das Verfahren zur Bestimmung der hedonischen Geruchswirkung in Anlehnung an VDI 3930 Blatt 4 (vgl. Kapitel 3.1.3) angewendet. Von jedem Prüfer werden dabei insgesamt 3 Polaritätenprofile erhoben: Duft, Gestank und Geruchsstoff. Um das automatisierte Ausfüllen durch die Prüfer zu verhindern werden zwei verschiedene Bögen der Polaritätenprofile (Vorgaben aus der VDI 3940 Blatt 4) verwendet, bei denen sowohl die Reihenfolge der Wortpaare, als auch deren Position auf der linken oder rechten Seite des Profils variiert wurden.

Die Polaritätenprofile werden von den Prüfern in Kenntnis des Substanzgeruches, mit dem Hinweis diesen in einer „deutlichen“ Intensität zu beschreiben, ausgefüllt.

Die Datenauswertung wird entsprechend Kapitel 3.1.3 vorgenommen.

4 Olfaktometrie

4.1 Allgemeines

Das Prüferkollektiv setzt sich für alle der 20 untersuchten Substanzen folgendermaßen zusammen:

Anzahl Prüfer: 12 (aufgeteilt auf die drei Teams A-C)

Messort: Labor der Olfasense GmbH

Die Prüfer stammen aus dem Olfasense Prüferkollektiv, sind nach den Anforderungen der DIN EN 13725 trainiert (vgl. Kapitel 3.1.1) und werden regelmäßig auf Eignung überprüft. Einzelne Prüfer sind über individuelle Kürzel identifizierbar.

Die Messung mit einem Team dauert durchschnittlich drei Stunden, sodass an einem Messtag Prüfungen mit bis zu zwei Teams durchgeführt werden können. Die Daten der Substanzbewertungen sind in den folgenden Kapiteln jeweils in der Auflistung der Geruchsempfindlichkeit der Teams (Beschreibung des Prüferkollektivs) angegeben.

Während der Vorversuche zur Aufbereitung (siehe Kapitel 3.2.1) und Darbietung der Substanzproben wurden die Injektionsmenge der Substanz und das benötigte Reinluftvolumen ermittelt. Der dabei verwendete Beutel wurde durch die Vorversuche vorkonditioniert und für alle drei Teams eingesetzt. Überstieg der Luftverbrauch am Olfaktometer das vorhandene Luftvolumen im Beutel, kamen mehrere Beutel, die ebenso vorkonditioniert wurden, zum Einsatz.

4.2 Aceton

4.2.1 Probenaufbereitung

Die Probenaufbereitung wurde entsprechend der folgenden Parameter durchgeführt:

Beutelvolumen: 50 L
 Vorbefüllung Probenbeutel: 5 L
 Verdampfungstemperatur LiGaVa: 180°C
 Substanzmenge injiziert: 1000 µL
 Flowrate nach Injektion: 5 L/min

Reinheit Substanz: 95%

Dichte Substanz: 0,791 g/cm³

resultierende rechnerische Konzentration im Mutterbeutel: 15029 mg/m³

Die Berechnung der Substanzkonzentration wurde entsprechend der Formeln (6) und (7) aus Kapitel 3.2.1 vorgenommen.

Insgesamt wurden für jedes Team drei 50 L-Beutel mit dem beschriebenen Vorgehen vorkonditioniert und vor Beginn jeder Messung frisch befüllt. Ein Beutel wurde damit jeweils für eine Messung mit Schwellenschätzungen und eine Messung mit Intensitätsbestimmung eingesetzt.

4.2.2 Beschreibung des Prüferkollektivs

Die Überprüfung zur Erfüllung der in der DIN EN13725 festgelegten Anforderungen zur Bewertung von n-Butanol wurde vor der Probenbewertung durchgeführt. Individuelle Ergebnisse der einzelnen Prüfer sind in Tabelle 5 dargestellt.

Tabelle 5: Aceton – Prüferüberprüfung nach DIN EN 13725

Anforderungen für die Bewertung von n-Butanol $20 \leq 10^{\bar{y}_{ITE}} \leq 80$ und $10^{s_{ITE}} \leq 2,3$

Team	Prüfer	individuelle Empfindlichkeit $10^{\bar{y}_{ITE}}$ in ppb	individuelle maximale Streuung / Standard-abweichung $10^{s_{ITE}}$ in ppb	Kriterium Empfindlichkeit erfüllt	Kriterium Standard-abweichung erfüllt
A	NIN	40,742	1,499	✓	✓
A	HOP	38,084	1,425	✓	✓
A	SÜM	54,328	1,506	✓	✓
A	BEM2	36,106	1,564	✓	✓
B	ADM	55,438	1,400	✓	✓
B	ADS	37,119	1,735	✓	✓
B	GIS	54,215	1,504	✓	✓

Team	Prüfer	individuelle Empfindlichkeit 10^{YTE} in ppb	individuelle maximale Streuung / Standard-abweichung 10^{SITE} in ppb	Kriterium Empfindlichkeit erfüllt	Kriterium Standard-abweichung erfüllt
B	MAF	37,148	1,514	✓	✓
C	ELS	55,797	1,579	✓	✓
C	STB	47,489	1,398	✓	✓
C	SCI	42,799	1,694	✓	✓
C	SCL2	34,204	1,732	✓	✓

Die Ergebnisse der drei Teams sind in Tabelle 6 zusammengestellt.

Tabelle 6: Aceton – Geruchsempfindlichkeit der Teams auf n-Butanol nach DIN EN 13725

Datum	Team	Empfindlichkeit in ppb	Präzision $r \leq 0,477$	Genauigkeit $A \leq 0,217$	Mess-leiter	Prüfer 1	Prüfer 2	Prüfer 3	Prüfer 4
27.02.2018	A	39,91	0,2803	0,1525	WEK	NIN	HOP	SÜM	BEM2
02.03.2018	B	42,26	0,3000	0,1419	BRL2	ADM	ADS	GIS	MAF
21.03.2018	C	42,45	0,2952	0,1248	BRL2	ELS	STB	SCI	SCL2

Sowohl alle Prüfer, als auch das gesamte Team, erfüllen damit die Anforderungen nach DIN EN 13725.

4.2.3 Geruchsstoffkonzentration

Für die Bestimmung der Geruchsstoffkonzentration wurden 12 Prüfer eingesetzt, die jeweils 10 gültige Schwellenschätzungen zur Bestimmung der Geruchsstoffkonzentration abgeben mussten. Diese 10 Schwellenschätzungen wurden auf jeweils drei Messungen aufgeteilt (vgl. Kapitel 3.2.4.1), sodass sich mit drei Teams insgesamt neun Messungen ergeben. Jede Messung erfüllt die normativen Anforderungen und weist ein $\Delta Z \leq 5$ auf.

Die ermittelten Geruchsstoffkonzentrationen für Aceton sind in der folgenden Tabelle 7 zusammengestellt. Die mittlere Geruchsstoffkonzentration liegt bei $563 \text{ GE}_E/\text{m}^3$, dies entspricht einer Geruchsschwelle von $26,69 \text{ mg}/\text{m}^3$.

Tabelle 7: Aceton – Geruchsstoffkonzentration nach DIN EN 13725

Einzeldaten für jeden Prüfer und Durchgang, aufgeteilt auf jeweils drei Messungen unter Angabe des geometrischen Gesamtmittelwertes und des oberen und unteren Wertes in Abhängigkeit des 95% Konfidenzintervalls

Prüfer- kürzel / Durch- gang	Geruchsstoffkonzentration in GE _E /m ³											
	NIN	HOP	SÜM	BEM 2	ADM	ADS	GIS	MAF	ELS	STB	SCI	SCL2
	Team A Messung 1				Team B Messung 1				Team C Messung 1			
1	1390	699	179	699	2654	1390	353	699	2782	383	383	383
2	1390	699	179	353	699	699	179	353	1355	383	712	1355
3	699	699	353	353	2654	1390	179	699	1355	712	383	383
	Team A Messung 2				Team B Messung 2				Team C Messung 2			
4	699	1390	179	699	1390	1390	353	1390	1355	383	383	383
5	699	1390	179	353	1390	699	353	699	1355	383	712	203
6	699	699	179	1390	1390	699	353	699	1355	383	712	383
7	699	353	179	179	699	699	353	353	1355	383	383	383
	Team A Messung 3				Team B Messung 3				Team C Messung 3			
8	699	353	179	699	1390	1390	353	1390	1355	712	383	203
9	699	1390	179	179	699	699	179	699	712	203	712	383
10	699	699	179	353	699	699	353	699	1355	203	203	383
Gesamtmittelwert (geometrisch)												563
95% Konfidenzintervall unterer Wert												432
95% Konfidenzintervall oberer Wert												733

Die Bewertungen der Geruchsstoffkonzentration sind sowohl innerhalb der Teams als auch teamübergreifend homogen.

4.2.4 Intensitäten und Weber-Fechner-Koeffizient

Aus den Einzelbewertungen der unterschiedlichen Prüfer (siehe Anhang A.1.1) ergibt sich durch die Datenaufbereitung entsprechend Kapitel 3.1.2 die Häufigkeit der Intensitätsüberschreitung bezüglich der zugehörigen logarithmierten Verdünnungszahlen wie in Tabelle 8 dargestellt.

Tabelle 8: Aceton – Zuordnung der prozentualen Häufigkeiten der Intensitätsüberschreitungen zu den vorgegebenen Logarithmen der Verdünnungszahlen

logZ / Häufigkeit	3,3	3,0	2,7	2,4	2,1	1,8	1,5	1,2	0,9	0,7
$H(I > 0)$	0,31	0,78	0,81	0,89	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00
$H(I > 1)$	0,11	0,25	0,39	0,50	0,81	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00
$H(I > 2)$	0,03	0,06	0,14	0,17	0,50	0,78	1,00	1,00	1,00	1,00
$H(I > 3)$	0,00	0,06	0,03	0,03	0,11	0,33	0,67	0,96	1,00	1,00
$H(I > 4)$	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,11	0,36	0,71	0,92	1,00
$H(I > 5)$	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,06	0,33	0,81	0,75

Durch Auftragung der Intensitätshäufigkeiten über die logarithmierten Verdünnungszahlen ergeben sich für $H(I > 0)$ bis $H(I > 4)$ fünf einzelne Diagramme, aus denen sich die 16-, 50- und 84-Perzentile $\hat{Z}_{16}$, $\hat{Z}_{50}$ und $\hat{Z}_{84}$ graphisch ableiten lassen (Daten siehe Tabelle 9).

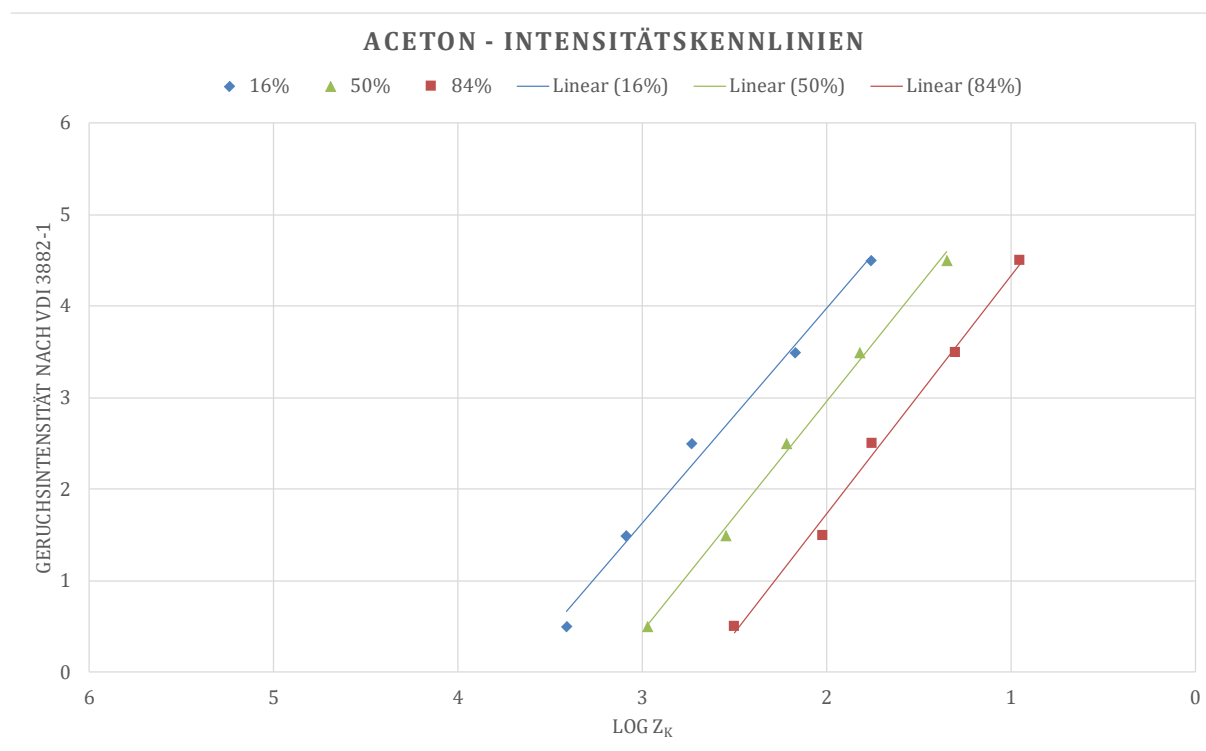
Tabelle 9: Aceton – Kenngrößen der Intensitätsstufen I_s

Graphisch ermittelt aus der Auftragung der Häufigkeiten der Intensitätsüberschreitung über die logarithmierten Verdünnungsstufen

I_s	$I = I_s + 0,5$	log Z_{16}	log Z_{50}	log Z_{84}
0	0,5	3,41	2,97	2,50
1	1,5	3,09	2,55	2,02
2	2,5	2,73	2,22	1,75
3	3,5	2,17	1,82	1,30
4	4,5	1,76	1,35	0,95

Durch Auftragung der Daten aus Tabelle 9 ergibt sich die folgende Abbildung 5.

Abbildung 5: Aceton - Intensitätskennlinien für $\hat{Z}_{16}$, $\hat{Z}_{50}$ und $\hat{Z}_{84}$ nach VDI 3882-1



Quelle: eigene Darstellung Olfasense GmbH

Die Parameter, die sich für diese Kennlinien ergeben sind in der folgenden Tabelle 10 zusammengestellt.

Tabelle 10: Aceton – Parameter der Geradengleichungen der 16-, 50- und 84-Perzentile

Angabe der Korrelationskoeffizienten R, der Bestimmtheitsmaße R^2 sowie der Steigung b und des Achsenabschnittes a

Parameter	Formelzeichen	◆ 16%	▲ 50%	■ 84%
Korrelationskoeffizient	R	-0,995	-0,998	-0,997
Bestimmtheitsmaß	R^2	0,990	0,997	0,994
Steigung	b	-2,35	-2,51	-2,60
Achsenabschnitt	a	8,68	7,98	6,94

Aus dieser Darstellung lässt sich der Weber-Fechner-Koeffizient mit $k_w = 2,51$ ableiten, sodass sich gemäß Formel (5) in Kapitel 3.1.2 der folgende Zusammenhang für Aceton ergibt:

$$I = 2,51 \cdot \log\left(\frac{c_R}{c_{GS}}\right) \quad (10)$$

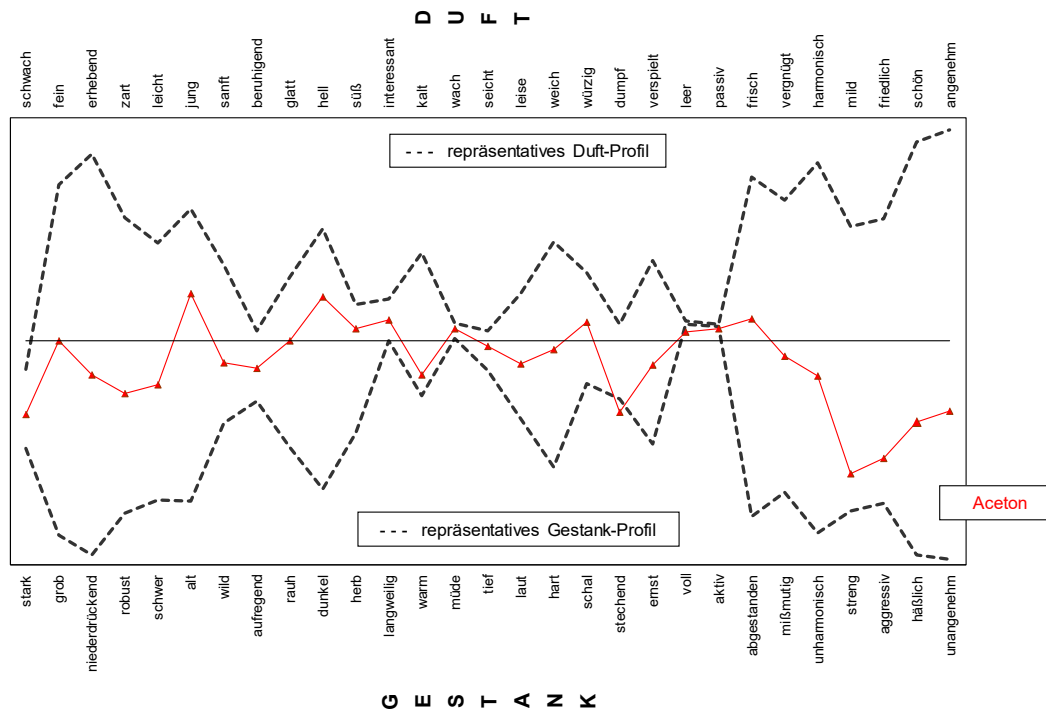
mit:

- I Intensität
- k_W Weber-Fechner-Koeffizient
- c_R Substanzkonzentration in der Riechprobe
- c_{GS} Substanzkonzentration an der Geruchsschwelle

4.2.5 Hedonische Geruchswirkung

Die hedonische Wirkung des Acetons ist in Abbildung 6 zusammen mit den repräsentativen Profilen für Duft und Gestank [VDI 3940-4] aufgetragen. Die Bewertung des Acetons wurde im Anschluss an die zweite Intensitätsbewertung (Punkt 9 Kapitel 3.2.4.1) vorgenommen, sodass den Prüfern der Geruch gegenwärtig war.

Abbildung 6: Aceton – Polaritätenprofil für Aceton, Duft und Gestank



repräsentative Profile für Duft und Gestank entsprechend der Daten aus VDI 3940-4

Quelle: Darstellung aus VDI 3940-4; ergänzt um substanzspezifische Daten

Der Produkt-Moment-Korrelationskoeffizient nach Pearson für das Konzept Duft ergibt sich zu -0,19. Für die Korrelation mit dem Konzept Gestank ergibt sich ein Wert von +0,39.

4.2.6 Geruchscharakter

Für die Bewertung des Geruchscharakters wurde Aceton mit einer Verdünnung von 1:23 in einen Nalophan®-Beutel überführt und von 5 Prüfern anhand des Charakters bewertet.

Während alle 5 Prüfer die Geruchssprobe als stechend beschrieben, wurde sie weiterhin je drei Mal als „Lösungsmittel“, „synthetisch“ und „Nagellack“ beschrieben. Weitere Assoziationen waren „süßlich“ und „Klebstoff“.

4.3 2-Ethylhexanol

4.3.1 Probenaufbereitung

Die Probenaufbereitung wurde entsprechend der folgenden Parameter durchgeführt:

Beutelvolumen:	45 L
Vorbefüllung Probenbeutel:	5 L
Verdampfungstemperatur LiGaVa:	200°C
Substanzmenge injiziert:	5 µL
Flowrate nach Injektion:	1 L/min
Reinheit Substanz:	99,6%
Dichte Substanz:	0,833 g/cm ³
Aggregatzustand:	flüssig

resultierende rechnerische Konzentration im Mutterbeutel: 92,2 mg/m³

Die Berechnung der Substanzkonzentration wurde entsprechend der Formeln (6) und (7) aus Kapitel 3.2.1 vorgenommen.

Für die Vorversuche und die Darbietung der Proben an die Geruchsprüfer wurde jeweils derselbe 45 L Beutel verwendet.

4.3.2 Beschreibung des Prüferkollektivs

Die Überprüfung zur Erfüllung der in der DIN EN13725 festgelegten Anforderungen zur Bewertung von n-Butanol wurde vor der Probenbewertung durchgeführt. Individuelle Ergebnisse der einzelnen Prüfer sind in Tabelle 11 dargestellt.

Tabelle 11: 2-Ethylhexanol – Prüferüberprüfung nach DIN EN 13725

Anforderungen für die Bewertung von n-Butanol $20 \leq 10^{\bar{y}_{ITE}} \leq 80$ und $10^{s_{ITE}} \leq 2,3$

Team	Prüfer	individuelle Empfindlichkeit $10^{\bar{y}_{ITE}}$ in ppb	individuelle maximale Streuung / Standard-abweichung $10^{s_{ITE}}$ in ppb	Kriterium Empfindlichkeit erfüllt	Kriterium Standard-abweichung erfüllt
A	CHA	54,107	1,417	✓	✓
A	KOI	44,224	1,384	✓	✓
A	LEJ	41,302	1,772	✓	✓
A	SCI	44,272	1,712	✓	✓
B	BEM2	39,969	1,493	✓	✓
B	HAU	70,872	1,555	✓	✓

Team	Prüfer	individuelle Empfindlichkeit 10^{YTE} in ppb	individuelle maximale Streuung / Standard-abweichung 10^{SITE} in ppb	Kriterium Empfindlichkeit erfüllt	Kriterium Standard-abweichung erfüllt
B	RIS2	52,326	1,588	✓	✓
B	SCB	51,900	1,547	✓	✓
C	ADM	63,618	1,396	✓	✓
C	ADS	42,590	1,770	✓	✓
C	HAM4	55,434	1,463	✓	✓
C	MAF	34,773	1,517	✓	✓

Die Ergebnisse der drei Teams sind in Tabelle 12 zusammengestellt.

Tabelle 12: 2-Ethylhexanol – Geruchsempfindlichkeit der Teams auf n-Butanol nach DIN EN 13725

Datum	Team	Empfindlichkeit in ppb	Präzision $r \leq 0,477$	Genauigkeit $A \leq 0,217$	Mess-leiter	Prüfer 1	Prüfer 2	Prüfer 3	Prüfer 4
28.02.2018	A	35,71	0,2905	0,1472	WEK	CHA	KOI	LEJ	SCI
01.03.2018	B	59,33	0,2936	0,1523	BRL2	BEM2	HAU	RIS2	SCB
01.03.2018	C	42,40	0,2967	0,1466	BRL2	ADM	ADS	HAM4	MAF

Sowohl alle Prüfer, als auch das gesamte Team, erfüllen damit die Anforderungen nach DIN EN 13725.

4.3.3 Geruchsstoffkonzentration

Für die Bestimmung der Geruchsstoffkonzentration wurden 12 Prüfer eingesetzt, die jeweils 10 gültige Schwellenschätzungen zur Bestimmung der Geruchsstoffkonzentration abgeben mussten. Diese 10 Schwellenschätzungen wurden auf jeweils drei Messungen aufgeteilt (vgl. Kapitel 3.2.4.1), sodass sich mit drei Teams insgesamt neun Messungen ergeben. Jede Messung erfüllt die normativen Anforderungen und weist ein $\Delta Z \leq 5$ auf.

Die ermittelten Geruchsstoffkonzentrationen für 2-Ethylhexanol sind in der folgenden Tabelle 13 zusammengestellt. Die mittlere Geruchsstoffkonzentration der drei Teams liegt bei $724 \text{ GE}_E/\text{m}^3$.

Tabelle 13: 2-Ethylhexanol – Geruchsstoffkonzentration nach DIN EN 13725

Einzeldaten für jeden Prüfer und Durchgang, aufgeteilt auf jeweils drei Messungen unter Angabe des geometrischen Gesamtmittelwertes und des oberen und unteren Wertes in Abhängigkeit des 95% Konfidenzintervalls

Prüfer- kürzel / Durch- gang	Geruchsstoffkonzentration in GE _E /m ³											
	LEJ	KOI	SCI	CHA	HAU	SCB	RIS2	BEM 2	HAM 4	ADS	ADM	MAF
	Team A Messung 1				Team B Messung 1				Team C Messung 1			
1	1390	179	1390	1390	353	1390	699	699	353	1390	699	1390
2	1390	353	1390	699	353	1390	699	699	353	699	699	1390
3	699	699	699	699	699	1390	353	353	699	699	1390	1390
	Team A Messung 2				Team B Messung 2				Team C Messung 2			
4	699	699	1390	699	699	1390	699	699	699	699	699	1390
5	699	179	699	699	699	1390	353	1390	699	1390	699	1390
6	699	353	699	353	699	699	353	699	699	1390	699	1390
7	353	353	699	353	699	699	353	699	353	1390	1390	1390
	Team A Messung 3				Team B Messung 3				Team C Messung 3			
8	699	353	699	699	699	699	353	1390	353	1390	699	1390
9	1390	353	699	699	1390	699	699	699	353	699	699	1390
10	699	353	699	699	1390	699	699	699	353	699	1390	699
Gesamtmittelwert (geometrisch)												724
95% Konfidenzintervall unterer Wert												556
95% Konfidenzintervall oberer Wert												943

Die scheinbare Abnahme der Konzentration im Mutterbeutel, die sich aus der GC-MS-Analytik ergibt (vgl. Tabelle 127 in Kapitel 5.1), kann durch Messungenauigkeiten bedingt sein. Die Daten, die sich aus der olfaktometrischen Messung ergeben (vgl. Tabelle 13), deuten hingegen nicht auf eine Abnahme der Konzentration hin. Die Bewertungen der Geruchsstoffkonzentration sind sowohl innerhalb der Teams als auch teamübergreifend homogen.

4.3.4 Intensitäten und Weber-Fechner-Koeffizient

Aus den Einzelbewertungen der unterschiedlichen Prüfer (siehe Anhang A.1.2) ergibt sich durch die Datenaufbereitung entsprechend Kapitel 3.1.2 die Häufigkeit der Intensitätsüberschreitung bezüglich der zugehörigen logarithmierten Verdünnungszahlen wie in Tabelle 14 dargestellt.

Tabelle 14: 2-Ethylhexanol – Zuordnung der prozentualen Häufigkeiten der Intensitätsüberschreitungen zu den vorgegebenen Logarithmen der Verdünnungszahlen

logZ / Häufigkeit	3,30	2,99	2,70	2,39	2,11	1,82	1,53	1,25	0,95	0,65
$H(I > 0)$	0,31	0,58	0,92	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00
$H(I > 1)$	0,03	0,08	0,56	0,75	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00
$H(I > 2)$	0,00	0,00	0,28	0,50	0,78	1,00	0,88	1,00	1,00	1,00
$H(I > 3)$	0,00	0,00	0,00	0,06	0,39	0,64	0,54	0,83	0,97	1,00
$H(I > 4)$	0,00	0,00	0,00	0,00	0,06	0,19	0,33	0,56	0,67	0,83
$H(I > 5)$	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,03	0,04	0,14	0,31	0,42

Durch Auftragung der Intensitätshäufigkeiten über die logarithmierten Verdünnungszahlen ergeben sich für $H(I > 0)$ bis $H(I > 4)$ fünf einzelne Diagramme, aus denen sich die 16-, 50- und 84-Perzentile $\hat{Z}_{16}$, $\hat{Z}_{50}$ und $\hat{Z}_{84}$ graphisch ableiten lassen (Daten siehe Tabelle 15).

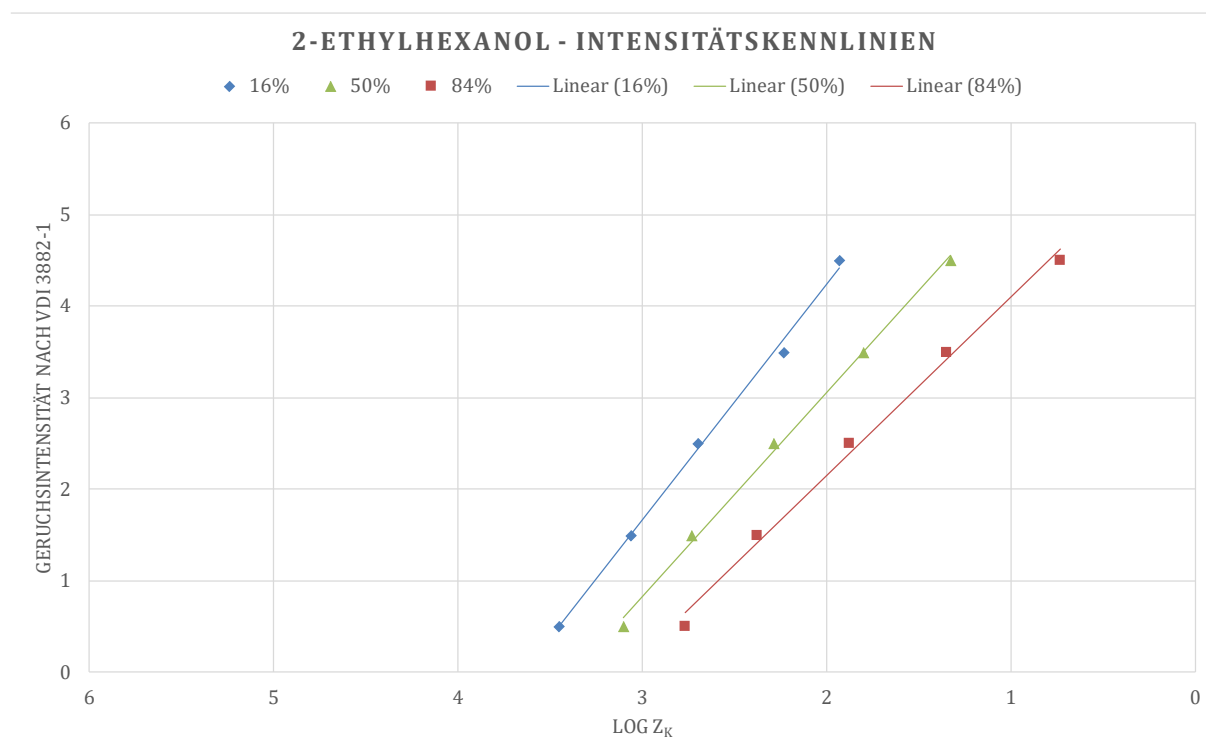
Tabelle 15: 2-Ethylhexanol – Kenngrößen der Intensitätsstufen I_s

Graphisch ermittelt aus der Auftragung der Häufigkeiten der Intensitätsüberschreitung über die logarithmierten Verdünnungsstufen

I_s	$I = I_s + 0,5$	log Z_{16}	log Z_{50}	log Z_{84}
0	0,5	3,45	3,10	2,77
1	1,5	3,06	2,73	2,38
2	2,5	2,70	2,29	1,88
3	3,5	2,23	1,80	1,35
4	4,5	1,93	1,33	0,73

Durch Auftragung der Daten aus Tabelle 15 ergibt sich die folgende Abbildung 7.

Abbildung 7: 2-Ethylhexanol – Intensitätskennlinien für $\hat{Z}_{16}$, $\hat{Z}_{50}$ und $\hat{Z}_{84}$ nach VDI 3882-1



Quelle: eigene Darstellung Olfasense GmbH

Die Parameter, die sich für diese Kennlinien ergeben sind in der folgenden Tabelle 16 zusammengestellt.

Tabelle 16: 2-Ethylhexanol – Parameter der Geradengleichungen der 16-, 50- und 84-Perzentile

Angabe der Korrelationskoeffizienten R, der Bestimmtheitsmaße R^2 sowie der Steigung b und des Achsenabschnittes a

Parameter	Formelzeichen	◆ 16%	▲ 50%	■ 84%
Korrelationskoeffizient	R	-0,998	-0,999	-0,997
Bestimmtheitsmaß	R^2	0,997	0,997	0,993
Steigung	b	-2,58	-2,23	-1,94
Achsenabschnitt	a	9,39	7,52	6,04

Aus dieser Darstellung lässt sich der Weber-Fechner-Koeffizient mit $k_w = 2,23$ ableiten, sodass sich gemäß Formel (5) in Kapitel 3.1.2 der folgende Zusammenhang für 2-Ethylhexanol ergibt:

$$I = 2,23 \cdot \log\left(\frac{c_R}{c_{GS}}\right) \quad (11)$$

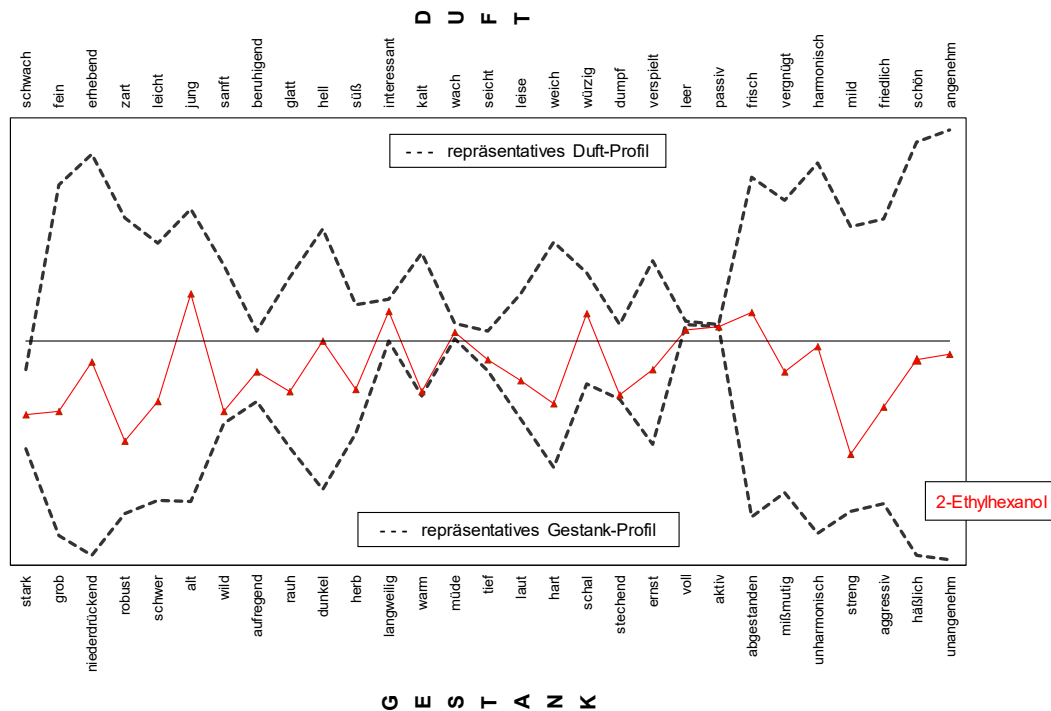
mit:

- I Intensität
- k_W Weber-Fechner-Koeffizient
- c_R Substanzkonzentration in der Riechprobe
- c_{GS} Substanzkonzentration an der Geruchsschwelle

4.3.5 Hedonische Geruchswirkung

Die hedonische Wirkung des 2-Ethylhexanols ist in Abbildung 8 zusammen mit den repräsentativen Profilen für Duft und Gestank [VDI 3940-4] aufgetragen. Die Bewertung des 2-Ethylhexanols wurde im Anschluss an die zweite Intensitätsbewertung (Punkt 9 Kapitel 3.2.4.1) vorgenommen, sodass den Prüfern der Geruch gegenwärtig war.

Abbildung 8: 2-Ethylhexanol – Polaritätenprofil für 2-Ethylhexanol, Duft und Gestank



repräsentative Profile für Duft und Gestank entsprechend der Daten aus VDI 3940-4

Quelle: Darstellung aus VDI 3940-4; ergänzt um substanzspezifische Daten

Der Produkt-Moment-Korrelationskoeffizient nach Pearson für das Konzept Duft ergibt sich zu +0,02. Für die Korrelation mit dem Konzept Gestank ergibt sich ein Wert von +0,29.

4.3.6 Geruchscharakter

Für die Bewertung des Geruchscharakters wurde 2-Ethylhexanol mit einer Verdünnung von 1:23 in einen Nalophan®-Beutel überführt und von 5 Prüfern anhand des Charakters bewertet.

Vier der Prüfer empfanden den Geruch als „mentholig“. Je drei Prüfer beschrieben den Geruch als „stechend“, „grün“ und „erfrischend“. Weitere Assoziationen waren „medizinisch“, „phenolig“, „würzig“ und „seifig“.

4.4 Acetophenon

4.4.1 Probenaufbereitung

Die Probenaufbereitung wurde entsprechend der folgenden Parameter durchgeführt:

Beutelvolumen:	50 L
Vorbefüllung Probenbeutel:	5 L
Verdampfungstemperatur LiGaVa:	215°C
Substanzmenge injiziert:	5 µL
Flowrate nach Injektion:	1 L/min
Reinheit Substanz:	100%
Dichte Substanz:	1,028 g/cm ³
Aggregatzustand:	flüssig

resultierende rechnerische Konzentration im Mutterbeutel: 102,8 mg/m³

Die Berechnung der Substanzkonzentration wurde entsprechend der Formeln (6) und (7) aus Kapitel 3.2.1 vorgenommen.

Für die Vorversuche und die Darbietung der Proben an die Geruchsprüfer wurde jeweils derselbe 50 L Beutel verwendet.

4.4.2 Beschreibung des Prüferkollektivs

Die Überprüfung zur Erfüllung der in der DIN EN13725 festgelegten Anforderungen zur Bewertung von n-Butanol wurde vor der Probenbewertung durchgeführt. Individuelle Ergebnisse der einzelnen Prüfer sind in Tabelle 17 dargestellt.

Tabelle 17: Acetophenon – Prüferüberprüfung nach DIN EN 13725

Anforderungen für die Bewertung von n-Butanol $20 \leq 10^{\bar{y}_{ITE}} \leq 80$ und $10^{s_{ITE}} \leq 2,3$

Team	Prüfer	individuelle Empfindlichkeit $10^{\bar{y}_{ITE}}$ in ppb	individuelle maximale Streuung / Standard-abweichung $10^{s_{ITE}}$ in ppb	Kriterium Empfindlichkeit erfüllt	Kriterium Standard-abweichung erfüllt
A	BEM2	25,611	1,431	✓	✓
A	HAM4	67,839	1,396	✓	✓
A	KOR	27,196	1,828	✓	✓
A	TRV	60,445	1,755	✓	✓
B	MAF	38,415	1,526	✓	✓
B	SCI2	55,560	1,494	✓	✓

Team	Prüfer	individuelle Empfindlichkeit 10^{YTE} in ppb	individuelle maximale Streuung / Standardabweichung 10^{SITE} in ppb	Kriterium Empfindlichkeit erfüllt	Kriterium Standardabweichung erfüllt
B	SCL3	34,555	1,919	✓	✓
B	STB	42,940	1,614	✓	✓
C	ELS	53,812	1,585	✓	✓
C	RAJ	21,724	1,507	✓	✓
C	RIS2	54,022	1,510	✓	✓
C	WEK	45,872	1,671	✓	✓

Die Ergebnisse der drei Teams sind in Tabelle 18 zusammengestellt.

Tabelle 18: Acetophenon – Geruchsempfindlichkeit der Teams auf n-Butanol nach DIN EN 13725

Datum	Team	Empfindlichkeit in ppb	Präzision $r \leq 0,477$	Genauigkeit $A \leq 0,217$	Messleiter	Prüfer 1	Prüfer 2	Prüfer 3	Prüfer 4
04.07.2018	A	43,78	0,2115	0,1241	BRL2	BEM2	HAM4	KOR	TRV
05.07.2018	B	24,52	0,2837	0,1259	BRL2	MAF	SCI2	SCL3	STB
06.07.2018	C	31,71	0,2361	0,1240	BRL2	ELS	RAJ	RIS2	WEK

Sowohl alle Prüfer, als auch das gesamte Team, erfüllen damit die Anforderungen nach DIN EN 13725.

4.4.3 Geruchsstoffkonzentration

Für die Bestimmung der Geruchsstoffkonzentration wurden 12 Prüfer eingesetzt, die jeweils 10 gültige Schwellenschätzungen zur Bestimmung der Geruchsstoffkonzentration abgeben mussten. Diese 10 Schwellenschätzungen wurden auf jeweils drei Messungen aufgeteilt (vgl. Kapitel 3.2.4.1), sodass sich mit drei Teams insgesamt neun Messungen ergeben. Jede Messung erfüllt die normativen Anforderungen und weist ein $\Delta Z \leq 5$ auf.

Die ermittelten Geruchsstoffkonzentrationen für Acetophenon sind in der folgenden Tabelle 19 zusammengestellt. Die mittlere Geruchsstoffkonzentration der drei Teams liegt bei $13142 \text{ GE}_E/\text{m}^3$.

Tabelle 19: Acetophenon – Geruchsstoffkonzentration nach DIN EN 13725

Einzeldaten für jeden Prüfer und Durchgang, aufgeteilt auf jeweils drei Messungen unter Angabe des geometrischen Gesamtmittelwertes und des oberen und unteren Wertes in Abhängigkeit des 95% Konfidenzintervalls

Prüfer- kürzel / Durch- gang	Geruchsstoffkonzentration in GE _E /m ³											
	TRV	BEM 2	HAM 4	KOR	MAF	SCL3	STB	SCI2	RAJ	RIS2	ELS	WEK
	Team A Messung 1				Team B Messung 1				Team C Messung 1			
1	23790	11271	5604	11271	22326	10074	22326	22326	11271	23790	23790	11271
2	11271	23790	5604	11271	48537	10074	22326	22326	11271	11271	5604	11271
3	11271	11271	5604	11271	22326	22326	10074	10074	11271	23790	11271	11271
	Team A Messung 2				Team B Messung 2				Team C Messung 2			
4	11271	11271	11271	23790	22326	10074	22326	22326	11271	23790	11271	11271
5	23790	11271	5604	23790	22326	10074	22326	22326	23790	23790	11271	11271
6	11271	11271	2782	11271	22326	10074	22326	10074	11271	5604	5604	11271
7	5604	23790	11271	2782	10074	10074	22326	4980	23790	23790	11271	11271
	Team A Messung 3				Team B Messung 3				Team C Messung 3			
8	11271	11271	11271	23790	22326	10074	22326	22326	23790	11271	5604	23790
9	5604	23790	11271	23790	22326	22326	10074	22326	5604	5604	11271	23790
10	5604	11271	11271	23790	22326	22326	22326	10074	23790	11271	5604	23790
Gesamtmittelwert (geometrisch)												13142
95% Konfidenzintervall unterer Wert												10298
95% Konfidenzintervall oberer Wert												17467

Die scheinbare Abnahme der Konzentration im Mutterbeutel, die sich aus der GC-MS-Analytik ergibt (vgl. Tabelle 127 in Kapitel 5.1), kann durch Messungenauigkeiten bedingt sein. Die Daten, die sich aus der olfaktometrischen Messung ergeben (vgl. Tabelle 19), deuten hingegen nicht auf eine Abnahme der Konzentration hin. Die Bewertungen der Geruchsstoffkonzentration sind sowohl innerhalb der Teams als auch teamübergreifend homogen.

4.4.4 Intensitäten und Weber-Fechner-Koeffizient

Aus den Einzelbewertungen der unterschiedlichen Prüfer (siehe Anhang A.1.3) ergibt sich durch die Datenaufbereitung entsprechend Kapitel 3.1.2 die Häufigkeit der Intensitätsüberschreitung bezüglich der zugehörigen logarithmierten Verdünnungszahlen wie in Tabelle 20 dargestellt.

Tabelle 20: Acetophenon – Zuordnung der prozentualen Häufigkeiten der Intensitätsüberschreitungen zu den vorgegebenen Logarithmen der Verdünnungszahlen

logZ / Häufigkeit	4,85	4,54	4,21	3,90	3,60	3,29	2,98	2,73	2,44
$H(I > 0)$	0,00	0,22	0,39	0,83	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00
$H(I > 1)$	0,00	0,06	0,06	0,28	0,86	1,00	1,00	1,00	1,00
$H(I > 2)$	0,00	0,00	0,06	0,00	0,31	0,97	1,00	1,00	1,00
$H(I > 3)$	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,33	0,69	1,00	1,00
$H(I > 4)$	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,08	0,33	0,53	0,86
$H(I > 5)$	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,08	0,11	0,33

Durch Auftragung der Intensitätshäufigkeiten über die logarithmierten Verdünnungszahlen ergeben sich für $H(I > 0)$ bis $H(I > 4)$ fünf einzelne Diagramme, aus denen sich die 16-, 50- und 84-Perzentile $\hat{Z}_{16}$, $\hat{Z}_{50}$ und $\hat{Z}_{84}$ graphisch ableiten lassen (Daten siehe Tabelle 21).

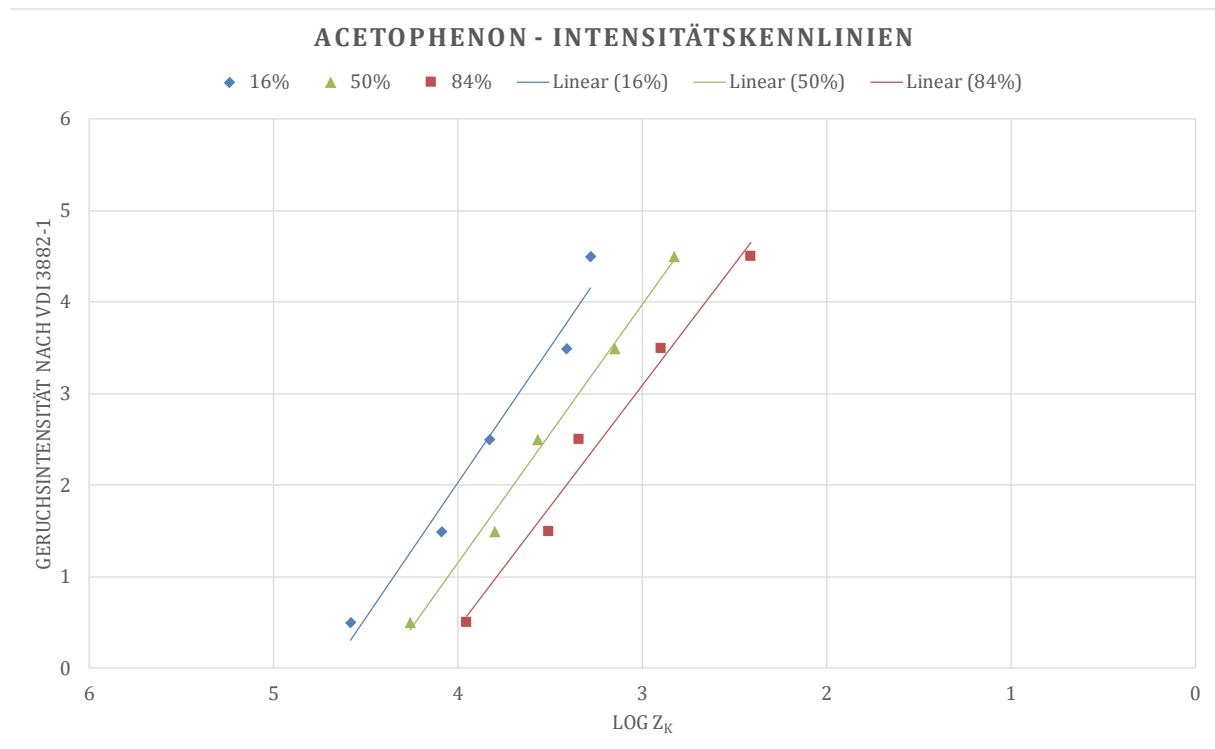
Tabelle 21: Acetophenon – Kenngrößen der Intensitätsstufen I_s

Graphisch ermittelt aus der Auftragung der Häufigkeiten der Intensitätsüberschreitung über die logarithmierten Verdünnungsstufen

I_s	$I = I_s + 0,5$	log Z_{16}	log Z_{50}	log Z_{84}
0	0,5	4,58	4,26	3,95
1	1,5	4,09	3,80	3,51
2	2,5	3,83	3,57	3,34
3	3,5	3,41	3,15	2,90
4	4,5	3,28	2,83	2,41

Durch Auftragung der Daten aus Tabelle 21 ergibt sich die folgende Abbildung 9.

Abbildung 9: Acetophenon – Intensitätskennlinien für $\hat{Z}_{16}$, $\hat{Z}_{50}$ und $\hat{Z}_{84}$ nach VDI 3882-1



Quelle: eigene Darstellung Olfasense GmbH

Die Parameter, die sich für diese Kennlinien ergeben sind in der folgenden Tabelle 22 zusammengestellt.

Tabelle 22: Acetophenon – Parameter der Geradengleichungen der 16-, 50- und 84-Perzentile

Angabe der Korrelationskoeffizienten R, der Bestimmtheitsmaße R^2 sowie der Steigung b und des Achsenabschnittes a

Parameter	Formelzeichen	◆ 16%	▲ 50%	■ 84%
Korrelationskoeffizient	R	-0,985	-0,996	-0,990
Bestimmtheitsmaß	R^2	0,970	0,992	0,980
Steigung	b	-2,96	-2,83	-2,65
Achsenabschnitt	a	13,85	12,46	11,05

Aus dieser Darstellung lässt sich der Weber-Fechner-Koeffizient mit $k_w = 2,83$ ableiten, sodass sich gemäß Formel (5) in Kapitel 3.1.2 der folgende Zusammenhang für Acetophenon ergibt:

$$I = 2,83 \cdot \log\left(\frac{c_R}{c_{GS}}\right) \quad (12)$$

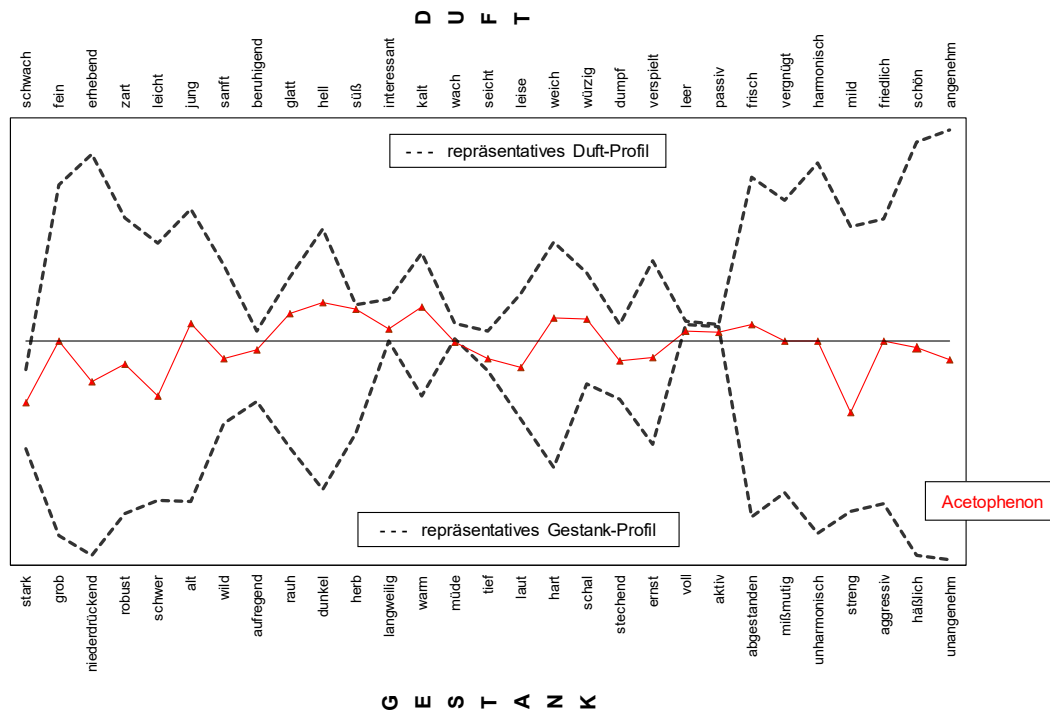
mit:

- I Intensität
- k_W Weber-Fechner-Koeffizient
- c_R Substanzkonzentration in der Riechprobe
- c_{GS} Substanzkonzentration an der Geruchsschwelle

4.4.5 Hedonische Geruchswirkung

Die hedonische Wirkung des Acetophenons ist in Abbildung 10 zusammen mit den repräsentativen Profilen für Duft und Gestank [VDI 3940-4] aufgetragen. Die Bewertung des Acetophenons wurde im Anschluss an die zweite Intensitätsbewertung (Punkt 9 Kapitel 3.2.4.1) vorgenommen, sodass den Prüfern der Geruch gegenwärtig war.

Abbildung 10: Acetophenon – Polaritätenprofil für Acetophenon, Duft und Gestank



repräsentative Profile für Duft und Gestank entsprechend der Daten aus VDI 3940-4

Quelle: Darstellung aus VDI 3940-4; ergänzt um substanzspezifische Daten

Der Produkt-Moment-Korrelationskoeffizient nach Pearson für das Konzept Duft ergibt sich zu +0,01. Für die Korrelation mit dem Konzept Gestank ergibt sich ein Wert von +0,25.

4.4.6 Geruchscharakter

Für die Bewertung des Geruchscharakters wurde Acetophenon mit einer Verdünnung von 1:999 in einen Nalophan®-Beutel überführt und von 5 Prüfern anhand des Charakters bewertet.

Während alle 5 Prüfer die Geruchsprobe als süß beschrieben, wurde sie weiterhin drei Mal als „synthetisch“ bzw. „kunststoffartig“ beschrieben. Weitere Assoziationen waren „Parfüm“, „Kräuter“, „würzig“ und „verbrannt“.

4.5 Benzothiazol

4.5.1 Probenaufbereitung

Die Probenaufbereitung wurde entsprechend der folgenden Parameter durchgeführt:

Beutelvolumen:	50 L
Vorbefüllung Probenbeutel:	5 L
Verdampfungstemperatur LiGaVa:	250°C
Substanzmenge injiziert:	2 µL
Flowrate nach Injektion:	1 L/min
Reinheit Substanz:	96%
Dichte Substanz:	1,238 g/cm ³
Aggregatzustand:	flüssig

resultierende rechnerische Konzentration im Mutterbeutel: 47,5 mg/m³

Die Berechnung der Substanzkonzentration wurde entsprechend der Formeln (6) und (7) aus Kapitel 3.2.1 vorgenommen.

Für die Vorversuche und die Darbietung der Proben an die Geruchsprüfer wurde jeweils derselbe 50 L Beutel verwendet.

4.5.2 Beschreibung des Prüferkollektivs

Die Überprüfung zur Erfüllung der in der DIN EN13725 festgelegten Anforderungen zur Bewertung von n-Butanol wurde vor der Probenbewertung durchgeführt. Individuelle Ergebnisse der einzelnen Prüfer sind in Tabelle 23 dargestellt.

Tabelle 23: Benzothiazol – Prüferüberprüfung nach DIN EN 13725

Anforderungen für die Bewertung von n-Butanol $20 \leq 10^{\bar{y}_{ITE}} \leq 80$ und $10^{s_{ITE}} \leq 2,3$

Team	Prüfer	individuelle Empfindlichkeit $10^{\bar{y}_{ITE}}$ in ppb	individuelle maximale Streuung / Standard-abweichung $10^{s_{ITE}}$ in ppb	Kriterium Empfindlichkeit erfüllt	Kriterium Standard-abweichung erfüllt
A	BEM2	29,053	1,484	✓	✓
A	JOA	48,724	1,407	✓	✓
A	SCI2	53,656	1,593	✓	✓
A	SCL3	37,039	1,920	✓	✓
B	HAM4	53,322	1,565	✓	✓
B	MAF	34,795	1,498	✓	✓

Team	Prüfer	individuelle Empfindlichkeit 10^{YTE} in ppb	individuelle maximale Streuung / Standardabweichung 10^{SITE} in ppb	Kriterium Empfindlichkeit erfüllt	Kriterium Standardabweichung erfüllt
B	PEL	34,400	1,743	✓	✓
B	SÜM	59,501	1,343	✓	✓
C	GRC	36,948	1,625	✓	✓
C	KOI	49,954	1,407	✓	✓
C	RAJ	22,997	1,505	✓	✓
C	SCL	57,302	1,361	✓	✓

Die Ergebnisse der drei Teams sind in Tabelle 24 zusammengestellt.

Tabelle 24: Benzothiazol – Geruchsempfindlichkeit der Teams auf n-Butanol nach DIN EN 13725

Datum	Team	Empfindlichkeit in ppb	Präzision $r \leq 0,477$	Genauigkeit $A \leq 0,217$	Messleiter	Prüfer 1	Prüfer 2	Prüfer 3	Prüfer 4
17.07.2018	A	44,50	0,3286	0,1154	BRL2	BEM2	JOA	SCI2	SCL3
18.07.2018	B	50,17	0,3186	0,1094	BRL2	HAM4	MAF	PEL	SÜM
19.07.2018	C	39,48	0,3182	0,1030	BRL2	GRC	KOI	RAJ	SCL

Sowohl alle Prüfer, als auch das gesamte Team, erfüllen damit die Anforderungen nach DIN EN 13725.

4.5.3 Geruchsstoffkonzentration

Für die Bestimmung der Geruchsstoffkonzentration wurden 12 Prüfer eingesetzt, die jeweils 10 gültige Schwellenschätzungen zur Bestimmung der Geruchsstoffkonzentration abgeben mussten. Diese 10 Schwellenschätzungen wurden auf jeweils drei Messungen aufgeteilt (vgl. Kapitel 3.2.4.1), sodass sich mit drei Teams insgesamt neun Messungen ergeben. Jede Messung erfüllt die normativen Anforderungen und weist ein $\Delta Z \leq 5$ auf.

Die ermittelten Geruchsstoffkonzentrationen für Benzothiazol sind in der folgenden Tabelle 25 zusammengestellt. Die mittlere Geruchsstoffkonzentration der drei Teams liegt bei $8829 \text{ GE}_E/\text{m}^3$.

Tabelle 25: Benzothiazol – Geruchsstoffkonzentration nach DIN EN 13725

Einzeldaten für jeden Prüfer und Durchgang, aufgeteilt auf jeweils drei Messungen unter Angabe des geometrischen Gesamtmittelwertes und des oberen und unteren Wertes in Abhängigkeit des 95% Konfidenzintervalls

Prüfer- kürzel / Durch- gang	Geruchsstoffkonzentration in GE _E /m ³											
	BEM 2	SCL3	SCI2	JOA	SÜM	MAF	PEL	HAM 4	SCL	KOI	RAJ	GRC
	Team A Messung 1				Team B Messung 1				Team C Messung 1			
1	23790	5604	23790	11271	5604	49691	23790	23790	5604	23790	49691	23790
2	5604	11271	11271	5604	23790	11271	23790	23790	5604	11271	11271	5604
3	11271	5604	5604	11271	11271	23790	11271	11271	2782	11271	23790	11271
	Team A Messung 2				Team B Messung 2				Team C Messung 2			
4	5604	2782	5604	2782	23790	23790	49691	11271	5604	23790	11271	11271
5	11271	1355	5604	5604	5604	11271	23790	23790	2782	11271	11271	23790
6	2782	2782	5604	2782	5604	23790	23790	11271	2782	11271	11271	11271
7	5604	2782	5604	5604	5604	23790	23790	11271	5604	11271	5604	5604
	Team A Messung 3				Team B Messung 3				Team C Messung 3			
8	5604	2782	5604	2782	5604	23790	23790	23790	2782	11271	2782	5604
9	5604	1355	11271	2782	5604	23790	23790	11271	2782	11271	11271	5604
10	5604	2782	5604	5604	5604	11271	11271	11271	2782	5604	11271	11271
Gesamtmittelwert (geometrisch)												8829
95% Konfidenzintervall unterer Wert												6779
95% Konfidenzintervall oberer Wert												11499

Anhand der GC-MS Daten (vgl. Tabelle 127 in Kapitel 5.1) lässt sich eine kontinuierliche Abnahme der Konzentration im Mutterbeutel ableiten, die sich ebenfalls in den ermittelten Geruchsstoffkonzentrationen widerspiegelt. Während in der ersten Messung im Durchschnitt 12420 GE_E/m³ ermittelt wurden, ergeben sich für die zweite und dritte Messung mittlere Geruchsstoffkonzentrationen von 8273 GE_E/m³ und 6843 GE_E/m³. Im Durchschnitt antworteten die Prüfer in der dritten Messung damit eine Verdünnungsstufe später als in der ersten Messung, während sich die Konzentration selbst nur etwa um 25% reduzierte. Daher sind neben der absinkenden Konzentration auch Adaptationseffekte der Prüfer an das Benzothiazol in Betracht zu ziehen.

4.5.4 Intensitäten und Weber-Fechner-Koeffizient

Aus den Einzelbewertungen der unterschiedlichen Prüfer (siehe Anhang A.1.4) ergibt sich durch die Datenaufbereitung entsprechend Kapitel 3.1.2 die Häufigkeit der Intensitätsüberschreitung bezüglich der zugehörigen logarithmierten Verdünnungszahlen wie in Tabelle 26 dargestellt.

Tabelle 26: Benzothiazol – Zuordnung der prozentualen Häufigkeiten der Intensitätsüberschreitungen zu den vorgegebenen Logarithmen der Verdünnungszahlen

logZ / Häufigkeit	4,54	4,21	3,90	3,60	3,29	2,98	2,73	2,44	2,18	1,58
$H(I > 0)$	0,25	0,50	0,86	0,94	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00
$H(I > 1)$	0,06	0,08	0,44	0,75	0,89	0,97	1,00	1,00	1,00	1,00
$H(I > 2)$	0,03	0,00	0,17	0,22	0,42	0,75	0,86	1,00	1,00	1,00
$H(I > 3)$	0,00	0,00	0,03	0,08	0,11	0,25	0,56	0,56	0,97	1,00
$H(I > 4)$	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,25	0,19	0,58	0,81
$H(I > 5)$	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,03	0,14	0,56

Durch Auftragung der Intensitätshäufigkeiten über die logarithmierten Verdünnungszahlen ergeben sich für $H(I > 0)$ bis $H(I > 4)$ fünf einzelne Diagramme, aus denen sich die 16-, 50- und 84-Perzentile $\hat{Z}_{16}$, $\hat{Z}_{50}$ und $\hat{Z}_{84}$ graphisch ableiten lassen (Daten siehe Tabelle 27).

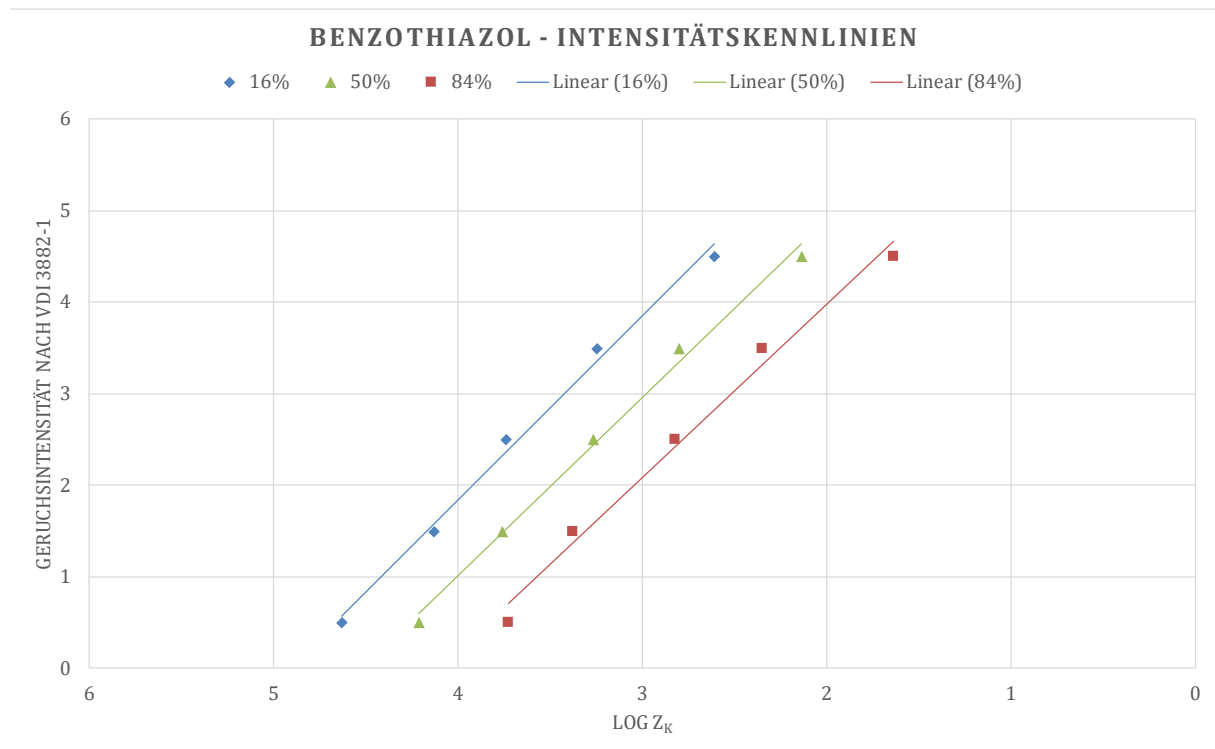
Tabelle 27: Benzothiazol – Kenngrößen der Intensitätsstufen I_s

Graphisch ermittelt aus der Auftragung der Häufigkeiten der Intensitätsüberschreitung über die logarithmierten Verdünnungsstufen

I_s	$I = I_s + 0,5$	log Z_{16}	log Z_{50}	log Z_{84}
0	0,5	4,63	4,21	3,73
1	1,5	4,13	3,76	3,38
2	2,5	3,74	3,27	2,82
3	3,5	3,25	2,80	2,35
4	4,5	2,61	2,14	1,64

Durch Auftragung der Daten aus Tabelle 27 ergibt sich die folgende Abbildung 11.

Abbildung 11: Benzothiazol – Intensitätskennlinien für $\hat{Z}_{16}$, $\hat{Z}_{50}$ und $\hat{Z}_{84}$ nach VDI 3882-1



Quelle: eigene Darstellung Olfasense GmbH

Die Parameter, die sich für diese Kennlinien ergeben sind in der folgenden Tabelle 28 zusammengestellt.

Tabelle 28: Benzothiazol – Parameter der Geradengleichungen der 16-, 50- und 84-Perzentile

Angabe der Korrelationskoeffizienten R, der Bestimmtheitsmaße R² sowie der Steigung b und des Achsenabschnittes a

Parameter	Formelzeichen	◆ 16%	▲ 50%	■ 84%
Korrelationskoeffizient	R	-0,996	-0,997	-0,994
Bestimmtheitsmaß	R ²	0,993	0,994	0,988
Steigung	b	-2,02	-1,95	-1,90
Achsenabschnitt	a	9,91	8,81	7,78

Aus dieser Darstellung lässt sich der Weber-Fechner-Koeffizient mit $k_w = 1,95$ ableiten, sodass sich gemäß Formel (5) in Kapitel 3.1.2 der folgende Zusammenhang für Benzothiazol ergibt:

$$I = 1,95 \cdot \log\left(\frac{c_R}{c_{GS}}\right) \quad (13)$$

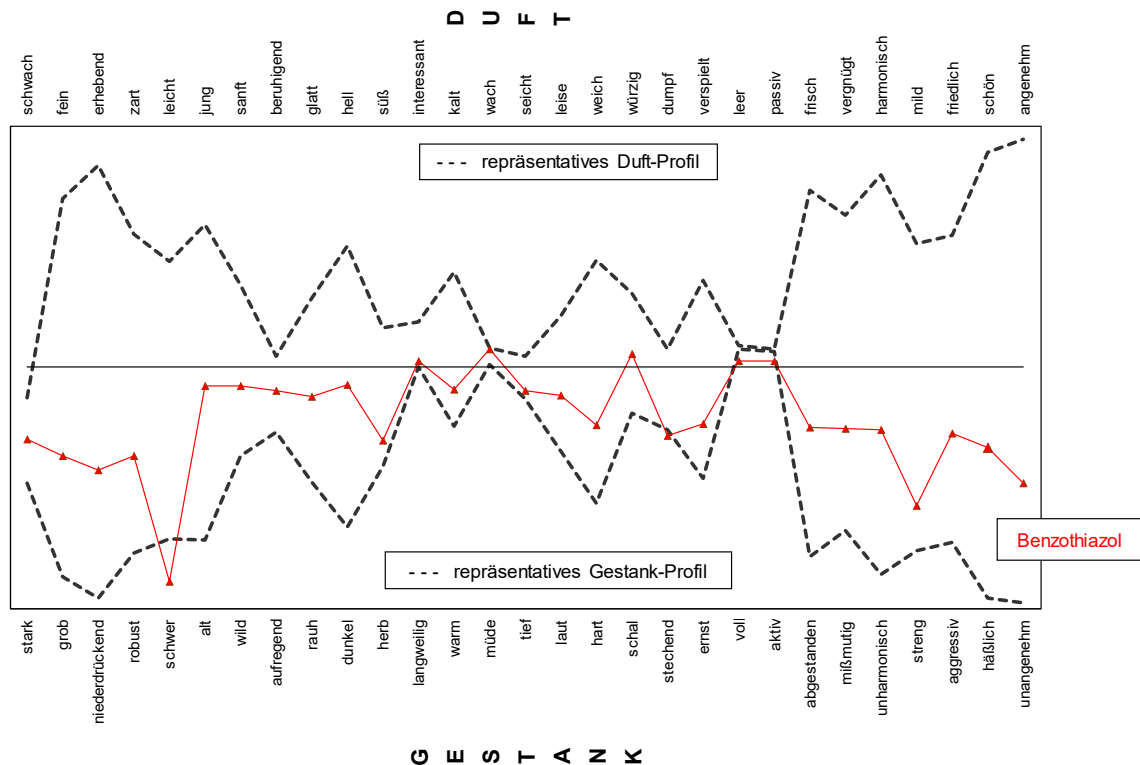
mit:

- I Intensität
- k_W Weber-Fechner-Koeffizient
- c_R Substanzkonzentration in der Riechprobe
- c_{GS} Substanzkonzentration an der Geruchsschwelle

4.5.5 Hedonische Geruchswirkung

Die hedonische Wirkung des Benzothiazols ist in Abbildung 12 zusammen mit den repräsentativen Profilen für Duft und Gestank [VDI 3940-4] aufgetragen. Die Bewertung des Benzothiazols wurde im Anschluss an die zweite Intensitätsbewertung (Punkt 9 Kapitel 3.2.4.1) vorgenommen, sodass den Prüfern der Geruch gegenwärtig war.

Abbildung 12: Benzothiazol – Polaritätenprofil für Benzothiazol, Duft und Gestank



repräsentative Profile für Duft und Gestank entsprechend der Daten aus VDI 3940-4

Quelle: Darstellung aus VDI 3940-4; ergänzt um substanzspezifische Daten

Der Produkt-Moment-Korrelationskoeffizient nach Pearson für das Konzept Duft ergibt sich zu -0,47. Für die Korrelation mit dem Konzept Gestank ergibt sich ein Wert von +0,70.

4.5.6 Geruchscharakter

Für die Bewertung des Geruchscharakters wurde Benzothiazol mit einer Verdünnung von 1:325 in einen Nalophan®-Beutel überführt und von 5 Prüfern anhand des Charakters bewertet.

Während alle 5 Prüfer die Geruchssprobe mit „Gummi“ beschrieben, waren weitere Beschreibungen „Tartanbahn“, „Kunststoff“ und „chemisch“.

4.6 2-Phenoxyethanol

4.6.1 Probenaufbereitung

Die Probenaufbereitung wurde entsprechend der folgenden Parameter durchgeführt:

Beutelvolumen: 50 L
 Vorbefüllung Probenbeutel: 5 L
 Verdampfungstemperatur LiGaVa: 215°C
 Substanzmenge injiziert: 25 µL
 Flowrate nach Injektion: 1 L/min

Reinheit Substanz: 99%
 Dichte Substanz: 1,102 g/cm³

resultierende rechnerische Konzentration im Mutterbeutel: 545,5 mg/m³

Die Berechnung der Substanzkonzentration wurde entsprechend der Formeln (6) und (7) aus Kapitel 3.2.1 vorgenommen.

Für die Vorversuche und die Darbietung der Proben an die Geruchsprüfer wurde jeweils derselbe 50 L Beutel verwendet.

4.6.2 Beschreibung des Prüferkollektivs

Die Überprüfung zur Erfüllung der in der DIN EN13725 festgelegten Anforderungen zur Bewertung von n-Butanol wurde vor der Probenbewertung durchgeführt. Individuelle Ergebnisse der einzelnen Prüfer sind in Tabelle 29 dargestellt.

Tabelle 29: 2-Phenoxyethanol – Prüferüberprüfung nach DIN EN 13725

Anforderungen für die Bewertung von n-Butanol $20 \leq 10^{\overline{y}ITE} \leq 80$ und $10^{sITE} \leq 2,3$

Team	Prüfer	individuelle Empfindlichkeit $10^{\overline{y}ITE}$ in ppb	individuelle maximale Streuung / Standard-abweichung 10^{sITE} in ppb	Kriterium Empfindlichkeit erfüllt	Kriterium Standard-abweichung erfüllt
A	JOA	50,316	1,408	✓	✓
A	MAF	33,651	1,539	✓	✓
A	SCL	58,956	1,335	✓	✓
A	SÜM	61,157	1,311	✓	✓
B	BEM2	34,642	1,413	✓	✓
B	GIJ	36,008	1,738	✓	✓
B	KOI	49,853	1,400	✓	✓
B	LEJ	39,746	1,797	✓	✓

Team	Prüfer	individuelle Empfindlichkeit 10^{YTE} in ppb	individuelle maximale Streuung / Standardabweichung 10^{SITE} in ppb	Kriterium Empfindlichkeit erfüllt	Kriterium Standardabweichung erfüllt
C	ELS	49,994	1,404	✓	✓
C	RAJ	23,749	1,596	✓	✓
C	RIS2	53,684	1,660	✓	✓
C	SCL3	35,909	1,828	✓	✓

Die Ergebnisse der drei Teams sind in Tabelle 30 zusammengestellt.

Tabelle 30: 2-Phenoxyethanol – Geruchsempfindlichkeit der Teams auf n-Butanol nach DIN EN 13725

Datum	Team	Empfindlichkeit in ppb	Präzision $r \leq 0,477$	Genauigkeit $A \leq 0,217$	Messleiter	Prüfer 1	Prüfer 2	Prüfer 3	Prüfer 4
24.07.2018	A	52,60	0,3236	0,1075	BRL2	JOA	MAF	SCL	SÜM
27.07.2018	B	47,55	0,3140	0,1011	BRL2	BEM2	GIJ	KOI	LEJ
26.07.2019	C	42,18	0,3174	0,1016	BRL2	ELS	RAJ	RIS2	SCL3

Sowohl alle Prüfer, als auch das gesamte Team, erfüllen damit die Anforderungen nach DIN EN 13725.

4.6.3 Geruchsstoffkonzentration

Für die Bestimmung der Geruchsstoffkonzentration wurden 12 Prüfer eingesetzt, die jeweils 10 gültige Schwellenschätzungen zur Bestimmung der Geruchsstoffkonzentration abgeben mussten. Diese 10 Schwellenschätzungen wurden auf jeweils drei Messungen aufgeteilt (vgl. Kapitel 3.2.4.1), sodass sich mit drei Teams insgesamt neun Messungen ergeben. Jede Messung erfüllt die normativen Anforderungen und weist ein $\Delta Z \leq 5$ auf.

Die ermittelten Geruchsstoffkonzentrationen für 2-Phenoxyethanol sind in der folgenden Tabelle 31 zusammengestellt. Die mittlere Geruchsstoffkonzentration der drei Teams liegt bei $131 \text{ GE}_E/\text{m}^3$.

Tabelle 31: 2-Phenoxyethanol – Geruchsstoffkonzentration nach DIN EN 13725

Einzeldaten für jeden Prüfer und Durchgang, aufgeteilt auf jeweils drei Messungen unter Angabe des geometrischen Gesamtmittelwertes und des oberen und unteren Wertes in Abhängigkeit des 95% Konfidenzintervalls

Prüfer- kürzel / Durch- gang	Geruchsstoffkonzentration in GE _E /m ³											
	SÜM	SCL	MAF	JOA	GIJ	LEJ	KOI	BEM 2	ELS	SCL3	RIS2	RAJ
	Team A Messung 1				Team B Messung 1				Team C Messung 1			
1	52	52	103	103	203	52	52	203	712	712	103	712
2	52	52	203	103	103	52	27	103	203	203	712	712
3	52	52	203	103	52	52	52	203	383	712	103	203
	Team A Messung 2				Team B Messung 2				Team C Messung 2			
4	203	103	103	203	383	52	103	103	203	383	203	712
5	103	103	103	103	52	52	103	203	103	712	203	383
6	52	103	203	203	103	52	52	383	103	383	203	103
7	103	103	103	203	52	103	103	383	103	712	203	203
	Team A Messung 3				Team B Messung 3				Team C Messung 3			
8	103	103	203	103	203	27	27	203	103	203	203	203
9	103	52	203	203	103	203	52	103	103	203	52	383
10	103	52	103	103	103	52	52	103	103	383	103	103
Gesamtmittelwert (geometrisch)												131
95% Konfidenzintervall unterer Wert												101
95% Konfidenzintervall oberer Wert												171

Die Bewertungen der Geruchsstoffkonzentration sind sowohl innerhalb der Teams als auch teamübergreifend homogen.

4.6.4 Intensitäten und Weber-Fechner-Koeffizient

Aus den Einzelbewertungen der unterschiedlichen Prüfer (siehe Anhang A.1.5) ergibt sich durch die Datenaufbereitung entsprechend Kapitel 3.1.2 die Häufigkeit der Intensitätsüberschreitung bezüglich der zugehörigen logarithmierten Verdünnungszahlen wie in Tabelle 32 dargestellt.

Tabelle 32: 2-Phenoxyethanol – Zuordnung der prozentualen Häufigkeiten der Intensitätsüberschreitungen zu den vorgegebenen Logarithmen der Verdünnungszahlen

logZ / Häufigkeit	2,98	2,73	2,44	2,18	1,85	1,58	1,29	0,99	0,69
$H(I > 0)$	0,08	0,25	0,33	0,89	0,97	1,00	1,00	1,00	1,00
$H(I > 1)$	0,00	0,08	0,06	0,36	0,44	1,00	1,00	1,00	1,00
$H(I > 2)$	0,00	0,00	0,00	0,08	0,08	0,64	0,83	0,97	1,00
$H(I > 3)$	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,25	0,28	0,72	1,00
$H(I > 4)$	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,03	0,33	0,72
$H(I > 5)$	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,03	0,31

Durch Auftragung der Intensitätshäufigkeiten über die logarithmierten Verdünnungszahlen ergeben sich für $H(I > 0)$ bis $H(I > 4)$ fünf einzelne Diagramme, aus denen sich die 16-, 50- und 84-Perzentile $\hat{Z}_{16}$, $\hat{Z}_{50}$ und $\hat{Z}_{84}$ graphisch ableiten lassen (Daten siehe Tabelle 33).

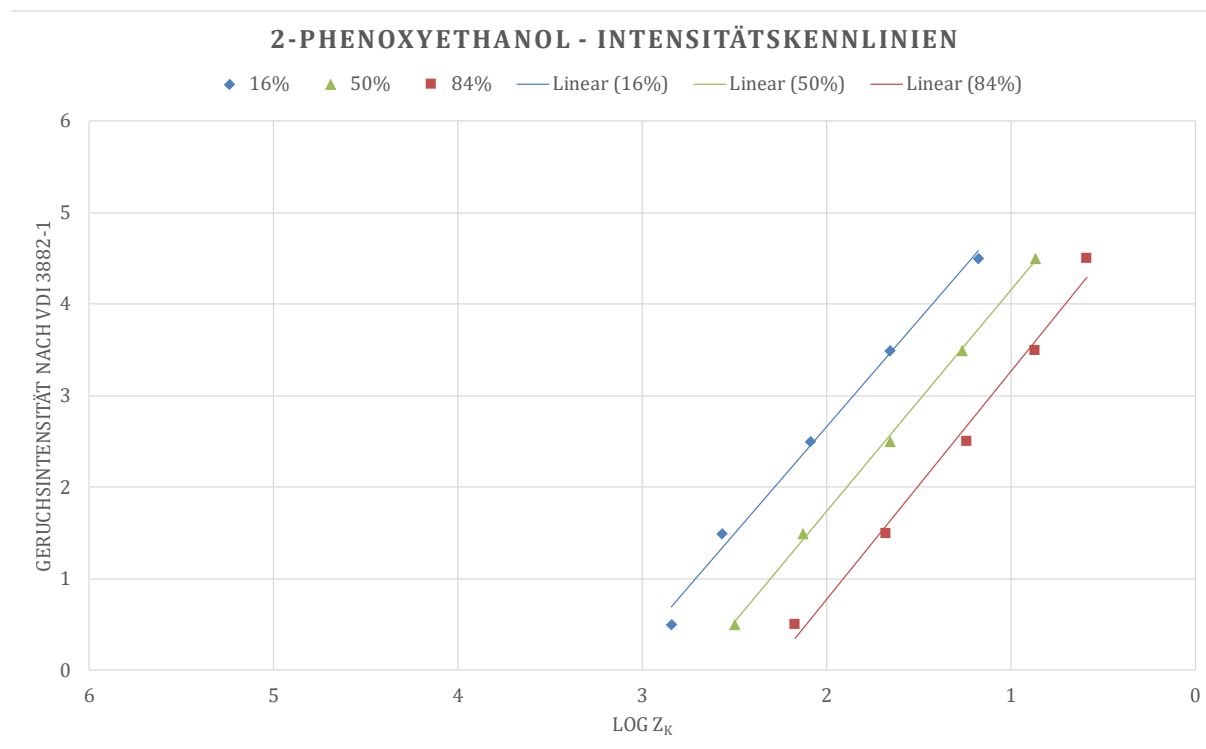
Tabelle 33: 2-Phenoxyethanol – Kenngrößen der Intensitätsstufen I_s

Graphisch ermittelt aus der Auftragung der Häufigkeiten der Intensitätsüberschreitung über die logarithmierten Verdünnungsstufen

I_s	$I = I_s + 0,5$	log Z_{16}	log Z_{50}	log Z_{84}
0	0,5	2,84	2,50	2,17
1	1,5	2,57	2,13	1,68
2	2,5	2,09	1,66	1,24
3	3,5	1,66	1,27	0,87
4	4,5	1,18	0,87	0,59

Durch Auftragung der Daten aus Tabelle 33 ergibt sich die folgende Abbildung 13.

Abbildung 13: 2-Phenoxyethanol – Intensitätskennlinien für Ž16, Ž50 und Ž84 nach VDI 3882-1



Quelle: eigene Darstellung Olfasense GmbH

Die Parameter, die sich für diese Kennlinien ergeben sind in der folgenden Tabelle 34 zusammengestellt.

Tabelle 34: 2-Phenoxyethanol – Parameter der Geradengleichungen der 16-, 50- und 84-Perzentile

Angabe der Korrelationskoeffizienten R, der Bestimmtheitsmaße R² sowie der Steigung b und des Achsenabschnittes a

Parameter	Formelzeichen	◆ 16%	▲ 50%	■ 84%
Korrelationskoeffizient	R	-0,996	-0,999	-0,995
Bestimmtheitsmaß	R ²	0,992	0,999	0,989
Steigung	b	-2,35	-2,42	-2,49
Achsenabschnitt	a	7,35	6,59	5,76

Aus dieser Darstellung lässt sich der Weber-Fechner-Koeffizient mit k_w = 2,42 ableiten, sodass sich gemäß Formel (5) in Kapitel 3.1.2 der folgende Zusammenhang für 2-Phenoxyethanol ergibt:

$$I = 2,42 \cdot \log\left(\frac{c_R}{c_{GS}}\right) \quad (14)$$

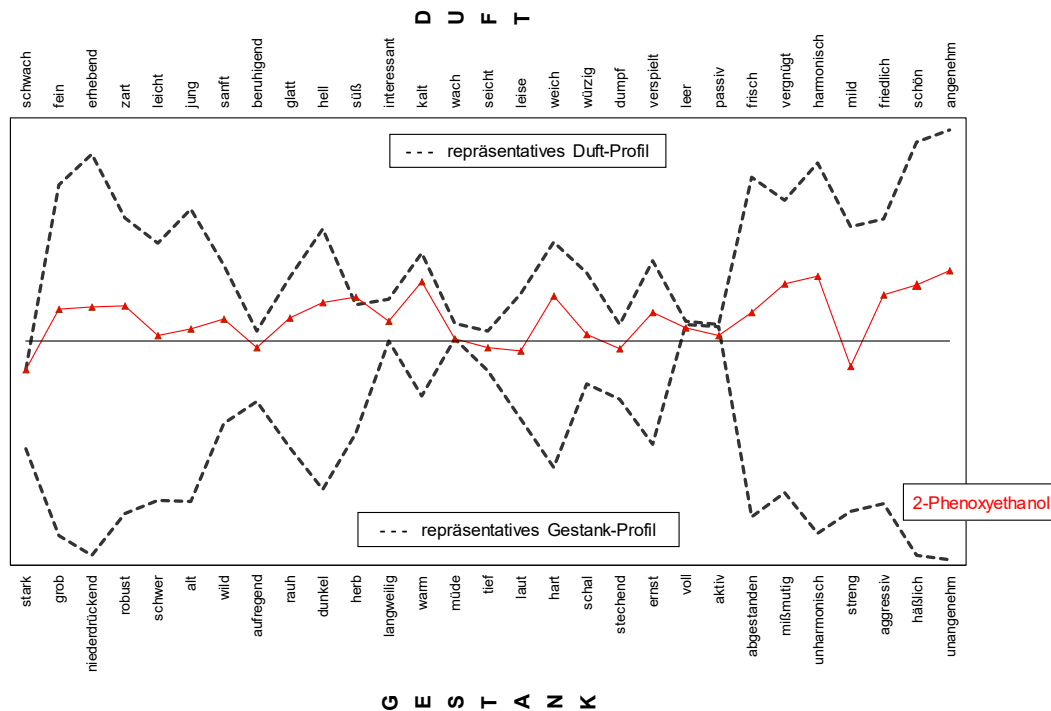
mit:

- I Intensität
- k_W Weber-Fechner-Koeffizient
- c_R Substanzkonzentration in der Riechprobe
- c_{GS} Substanzkonzentration an der Geruchsschwelle

4.6.5 Hedonische Geruchswirkung

Die hedonische Wirkung des 2-Phenoxyethanols ist in Abbildung 14 zusammen mit den repräsentativen Profilen für Duft und Gestank [VDI 3940-4] aufgetragen. Die Bewertung des 2-Phenoxyethanols wurde im Anschluss an die zweite Intensitätsbewertung (Punkt 9 Kapitel 3.2.4.1) vorgenommen, sodass den Prüfern der Geruch gegenwärtig war.

Abbildung 14: 2-Phenoxyethanol – Polaritätenprofil für 2-Phenoxyethanol, Duft und Gestank



repräsentative Profile für Duft und Gestank entsprechend der Daten aus VDI 3940-4

Quelle: Darstellung aus VDI 3940-4; ergänzt um substanzspezifische Daten

Der Produkt-Moment-Korrelationskoeffizient nach Pearson für das Konzept Duft ergibt sich zu +0,70. Für die Korrelation mit dem Konzept Gestank ergibt sich ein Wert von -0,47.

4.6.6 Geruchscharakter

Für die Bewertung des Geruchscharakters wurde 2-Phenoxyethanol mit einer Verdünnung von 1:16 in einen Nalophan®-Beutel überführt und von 5 Prüfern anhand des Charakters bewertet.

Während alle 5 Prüfer die Geruchsprobe als „Gummi“ beschrieben, waren weitere Assoziationen „stechend“, „chemisch“, „Plastik“ und „Reifen/Fahrradschlauch“.

4.7 Butansäure

4.7.1 Probenaufbereitung

Die Probenaufbereitung wurde entsprechend der folgenden Parameter durchgeführt:

Beutelvolumen:	70 L
Vorbefüllung Probenbeutel:	7 L
Verdampfungstemperatur LiGaVa:	180°C
Substanzmenge injiziert:	1 µL
Flowrate nach Injektion:	1 L/min
Reinheit Substanz:	99%
Dichte Substanz:	0,953 g/cm ³
Aggregatzustand:	flüssig

resultierende rechnerische Konzentration im Mutterbeutel: 13,48 mg/m³

Die Berechnung der Substanzkonzentration wurde entsprechend der Formeln (6) und (7) aus Kapitel 3.2.1 vorgenommen.

Für die Vorversuche und die Darbietung der Proben an die Geruchsprüfer wurde jeweils derselbe 70 L Beutel verwendet.

4.7.2 Beschreibung des Prüferkollektivs

Die Überprüfung zur Erfüllung der in der DIN EN13725 festgelegten Anforderungen zur Bewertung von n-Butanol wurde vor der Probenbewertung durchgeführt. Individuelle Ergebnisse der einzelnen Prüfer sind in Tabelle 35 dargestellt.

Tabelle 35: Butansäure – Prüferüberprüfung nach DIN EN 13725

Anforderungen für die Bewertung von n-Butanol $20 \leq 10^{\bar{y}_{ITE}} \leq 80$ und $10^{s_{ITE}} \leq 2,3$

Team	Prüfer	individuelle Empfindlichkeit $10^{\bar{y}_{ITE}}$ in ppb	individuelle maximale Streuung / Standard-abweichung $10^{s_{ITE}}$ in ppb	Kriterium Empfindlichkeit erfüllt	Kriterium Standard-abweichung erfüllt
A	BEM2	34,598	1,507	✓	✓
A	KOI	56,911	1,359	✓	✓
A	MAF	31,481	1,435	✓	✓
A	SÜM	59,112	1,338	✓	✓
B	FIH	41,540	1,554	✓	✓
B	GIS	57,469	1,450	✓	✓

Team	Prüfer	individuelle Empfindlichkeit 10^{YTE} in ppb	individuelle maximale Streuung / Standard-abweichung 10^{SITE} in ppb	Kriterium Empfindlichkeit erfüllt	Kriterium Standard-abweichung erfüllt
B	KOR	26,355	1,769	✓	✓
B	SCL3	39,510	1,852	✓	✓
C	ADM	55,243	1,492	✓	✓
C	ADS	40,569	1,608	✓	✓
C	GIJ	37,269	1,662	✓	✓
C	SCI2	51,584	1,595	✓	✓

Die Ergebnisse der drei Teams sind in Tabelle 36 zusammengestellt.

Tabelle 36: Butansäure – Geruchsempfindlichkeit der Teams auf n-Butanol nach DIN EN 13725

Datum	Team	Empfindlichkeit in ppb	Präzision $r \leq 0,477$	Genauigkeit $A \leq 0,217$	Mess-leiter	Prüfer 1	Prüfer 2	Prüfer 3	Prüfer 4
31.07.2018	A	42,18	0,2996	0,0946	BRL2	BEM2	KOI	MAF	SÜM
02.08.2018	B	37,42	0,2939	0,0845	BRL2	FIH	GIS	KOR	SCL3
03.08.2018	C	54,85	0,3004	0,0888	BRL2	ADM	ADS	GIJ	SCI2

Sowohl alle Prüfer, als auch das gesamte Team, erfüllen damit die Anforderungen nach DIN EN 13725.

4.7.3 Geruchsstoffkonzentration

Für die Bestimmung der Geruchsstoffkonzentration wurden 12 Prüfer eingesetzt, die jeweils 10 gültige Schwellenschätzungen zur Bestimmung der Geruchsstoffkonzentration abgeben mussten. Diese 10 Schwellenschätzungen wurden auf jeweils drei Messungen aufgeteilt (vgl. Kapitel 3.2.4.1), sodass sich mit drei Teams insgesamt neun Messungen ergeben. Jede Messung erfüllt die normativen Anforderungen und weist ein $\Delta Z \leq 5$ auf.

Die ermittelten Geruchsstoffkonzentrationen für Butansäure sind in der folgenden Tabelle 37 zusammengestellt. Die mittlere Geruchsstoffkonzentration der drei Teams liegt bei $12334 \text{ GE}_E/\text{m}^3$.

Tabelle 37: Butansäure – Geruchsstoffkonzentration nach DIN EN 13725

Einzeldaten für jeden Prüfer und Durchgang, aufgeteilt auf jeweils drei Messungen unter Angabe des geometrischen Gesamtmittelwertes und des oberen und unteren Wertes in Abhängigkeit des 95% Konfidenzintervalls

Prüfer- kürzel / Durch- gang	Geruchsstoffkonzentration in GE _E /m ³											
	SÜM	MAF	KOI	BEM 2	FIH	SCL3	GIS	KOR	GIJ	SCL2	ADM	ADS
	Team A Messung 1				Team B Messung 1				Team C Messung 1			
1	5604	11271	5604	23790	11271	23790	11271	49691	5604	11271	23790	23790
2	5604	11271	5604	5604	23790	23790	11271	11271	5604	11271	23790	23790
3	2782	11271	5604	11271	11271	49691	11271	23790	11271	11271	23790	49691
	Team A Messung 2				Team B Messung 2				Team C Messung 2			
4	2782	11271	2782	11271	11271	23790	23790	23790	11271	23790	23790	23790
5	2782	11271	5604	23790	5604	49691	11271	11271	11271	23790	23790	23790
6	2782	11271	5604	5604	11271	49691	11271	23790	11271	11271	23790	49691
7	5604	5604	5604	5604	23790	23790	5604	11271	23790	11271	11271	23790
	Team A Messung 3				Team B Messung 3				Team C Messung 3			
8	2782	5604	2782	11271	5604	49691	5604	11271	23790	11271	11271	49691
9	2782	11271	5604	5604	11271	11271	23790	11271	11271	11271	49691	23790
10	2782	11271	5604	11271	11271	49691	23790	49691	11271	23790	11271	11271
Gesamtmittelwert (geometrisch)												12334
95% Konfidenzintervall unterer Wert												9470
95% Konfidenzintervall oberer Wert												16063

Die Verdünnungen in denen die Prüfer einen Geruch wahrnehmen konnten, weichen zwischen dem empfindlichsten und dem unempfindlichsten Prüfer für Butansäure um bis zu 4 Verdünnungsstufen voneinander ab. Dennoch erfüllen die Messungen die normativen Vorgaben. Die Prüfergebnisse weisen für einzelne Prüfer eine gute Konstanz auf und sind insgesamt als homogen einzustufen.

4.7.4 Intensitäten und Weber-Fechner-Koeffizient

Aus den Einzelbewertungen der unterschiedlichen Prüfer (siehe Anhang A.1.6) ergibt sich durch die Datenaufbereitung entsprechend Kapitel 3.1.2 die Häufigkeit der Intensitätsüberschreitung bezüglich der zugehörigen logarithmierten Verdünnungszahlen wie in Tabelle 38 dargestellt.

Tabelle 38: Butansäure – Zuordnung der prozentualen Häufigkeiten der Intensitätsüberschreitungen zu den vorgegebenen Logarithmen der Verdünnungszahlen

logZ / Häufigkeit	4,85	4,54	4,21	3,90	3,60	3,29	2,98	2,73	2,44	2,18
$H(I > 0)$	0,00	0,44	0,56	0,64	0,92	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00
$H(I > 1)$	0,00	0,00	0,11	0,03	0,69	0,72	1,00	1,00	1,00	1,00
$H(I > 2)$	0,00	0,00	0,03	0,00	0,25	0,22	0,69	1,00	1,00	1,00
$H(I > 3)$	0,00	0,00	0,00	0,00	0,03	0,00	0,17	0,72	0,89	0,97
$H(I > 4)$	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,22	0,50	0,67
$H(I > 5)$	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,06	0,19

Durch Auftragung der Intensitätshäufigkeiten über die logarithmierten Verdünnungszahlen ergeben sich für $H(I > 0)$ bis $H(I > 4)$ fünf einzelne Diagramme, aus denen sich die 16-, 50- und 84-Perzentile $\hat{Z}_{16}$, $\hat{Z}_{50}$ und $\hat{Z}_{84}$ graphisch ableiten lassen (Daten siehe Tabelle 39).

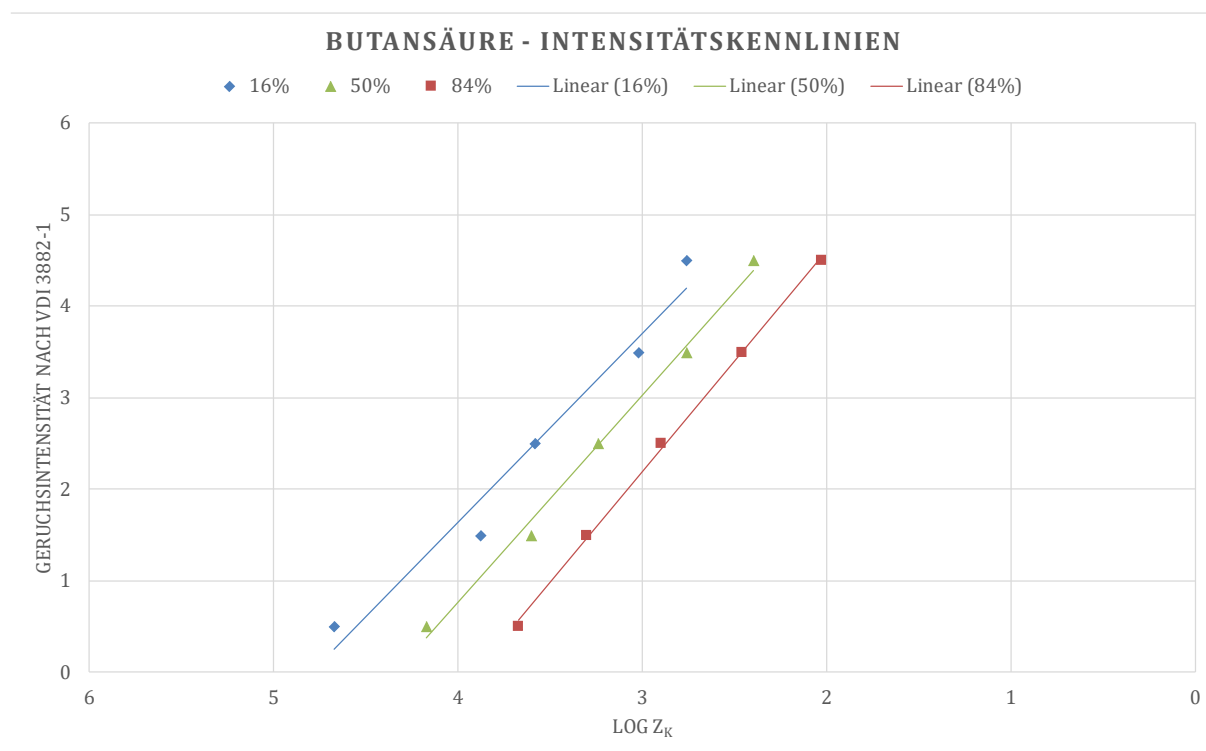
Tabelle 39: Butansäure – Kenngrößen der Intensitätsstufen I_s

Graphisch ermittelt aus der Auftragung der Häufigkeiten der Intensitätsüberschreitung über die logarithmierten Verdünnungsstufen

I_s	$I = I_s + 0,5$	log Z_{16}	log Z_{50}	log Z_{84}
0	0,5	4,67	4,17	3,67
1	1,5	3,88	3,60	3,30
2	2,5	3,58	3,24	2,90
3	3,5	3,02	2,76	2,46
4	4,5	2,76	2,40	2,03

Durch Auftragung der Daten aus Tabelle 39 ergibt sich die folgende Abbildung 15.

Abbildung 15: Butansäure – Intensitätskennlinien für Ž16, Ž50 und Ž84 nach VDI 3882-1



Quelle: eigene Darstellung Olfasense GmbH

Die Parameter, die sich für diese Kennlinien ergeben sind in der folgenden Tabelle 40 zusammengestellt.

Tabelle 40: Butansäure – Parameter der Geradengleichungen der 16-, 50- und 84-Perzentile

Angabe der Korrelationskoeffizienten R, der Bestimmtheitsmaße R² sowie der Steigung b und des Achsenabschnittes a

Parameter	Formelzeichen	◆ 16%	▲ 50%	■ 84%
Korrelationskoeffizient	R	-0,984	-0,997	-0,999
Bestimmtheitsmaß	R ²	0,967	0,994	0,999
Steigung	b	-2,07	-2,27	-2,42
Achsenabschnitt	a	9,90	9,84	9,46

Aus dieser Darstellung lässt sich der Weber-Fechner-Koeffizient mit $k_w = 2,27$ ableiten, sodass sich gemäß Formel (5) in Kapitel 3.1.2 der folgende Zusammenhang für Butansäure ergibt:

$$I = 2,27 \cdot \log\left(\frac{c_R}{c_{GS}}\right) \quad (15)$$

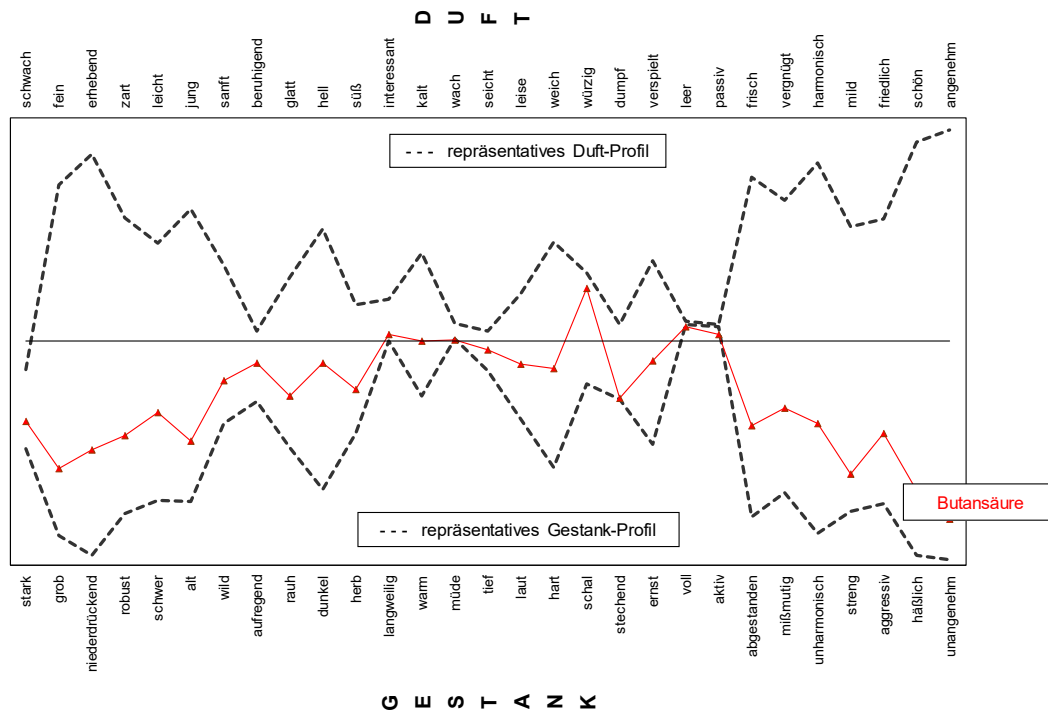
mit:

- I Intensität
- k_W Weber-Fechner-Koeffizient
- c_R Substanzkonzentration in der Riechprobe
- c_{GS} Substanzkonzentration an der Geruchsschwelle

4.7.5 Hedonische Geruchswirkung

Die hedonische Wirkung der Butansäure ist in Abbildung 16 zusammen mit den repräsentativen Profilen für Duft und Gestank [VDI 3940-4] aufgetragen. Die Bewertung der Butansäure wurde im Anschluss an die zweite Intensitätsbewertung (Punkt 9 Kapitel 3.2.4.1) vorgenommen, sodass den Prüfern der Geruch gegenwärtig war.

Abbildung 16: Butansäure – Polaritätenprofil für Butansäure, Duft und Gestank



repräsentative Profile für Duft und Gestank entsprechend der Daten aus VDI 3940-4

Quelle: Darstellung aus VDI 3940-4; ergänzt um substanzspezifische Daten

Der Produkt-Moment-Korrelationskoeffizient nach Pearson für das Konzept Duft ergibt sich zu -0,71. Für die Korrelation mit dem Konzept Gestank ergibt sich ein Wert von +0,87.

4.7.6 Geruchscharakter

Für die Bewertung des Geruchscharakters wurde Butansäure mit einer Verdünnung von 1:243 in einen Nalophan®-Beutel überführt und von 5 Prüfern anhand des Charakters bewertet.

Jeweils drei Prüfer empfanden die Geruchsprobe als „käsig“, „sauer“ und nach „Erbrochenem“ riechend. Weitere Beschreibungen waren „muffig“, „organisch“ und „schweißig“.

4.8 Essigsäure

4.8.1 Probenaufbereitung

Die Probenaufbereitung wurde entsprechend der folgenden Parameter durchgeführt:

Beutelvolumen:	40 L
Vorbefüllung Probenbeutel:	4 L
Verdampfungstemperatur LiGaVa:	130°C
Substanzmenge injiziert:	10 µL
Flowrate nach Injektion:	1 L/min
Reinheit Substanz:	99%
Dichte Substanz:	1,05 g/cm ³
Aggregatzustand:	flüssig

resultierende rechnerische Konzentration im Mutterbeutel: 259,9 mg/m³

Die Berechnung der Substanzkonzentration wurde entsprechend der Formeln (6) und (7) aus Kapitel 3.2.1 vorgenommen.

Für die Vorversuche und die Darbietung der Proben an die Geruchsprüfer wurde jeweils derselbe 40 L Beutel verwendet.

4.8.2 Beschreibung des Prüferkollektivs

Die Überprüfung zur Erfüllung der in der DIN EN13725 festgelegten Anforderungen zur Bewertung von n-Butanol wurde vor der Probenbewertung durchgeführt. Individuelle Ergebnisse der einzelnen Prüfer sind in Tabelle 41 dargestellt.

Tabelle 41: Essigsäure – Prüferüberprüfung nach DIN EN 13725

Anforderungen für die Bewertung von n-Butanol $20 \leq 10^{\bar{y}_{ITE}} \leq 80$ und $10^{s_{ITE}} \leq 2,3$

Team	Prüfer	individuelle Empfindlichkeit $10^{\bar{y}_{ITE}}$ in ppb	individuelle maximale Streuung / Standard-abweichung $10^{s_{ITE}}$ in ppb	Kriterium Empfindlichkeit erfüllt	Kriterium Standard-abweichung erfüllt
A	MEC	44,512	1,413	✓	✓
A	RAJ	27,019	1,726	✓	✓
A	SCL	60,331	1,346	✓	✓
A	STB	39,640	1,721	✓	✓
B	HAM4	41,451	1,462	✓	✓
B	HOP	38,626	1,488	✓	✓

Team	Prüfer	individuelle Empfindlichkeit 10^{YTE} in ppb	individuelle maximale Streuung / Standard-abweichung 10^{SITE} in ppb	Kriterium Empfindlichkeit erfüllt	Kriterium Standard-abweichung erfüllt
B	KOI	60,350	1,310	✓	✓
B	KOR	25,228	1,421	✓	✓
C	GÜU	46,875	1,603	✓	✓
C	RIS2	43,577	1,706	✓	✓
C	SCL3	39,366	1,855	✓	✓
C	TÄM	23,799	1,361	✓	✓

Die Ergebnisse der drei Teams sind in Tabelle 42 zusammengestellt.

Tabelle 42: Essigsäure – Geruchsempfindlichkeit der Teams auf n-Butanol nach DIN EN 13725

Datum	Team	Empfindlichkeit in ppb	Präzision $r \leq 0,477$	Genauigkeit $A \leq 0,217$	Mess-leiter	Prüfer 1	Prüfer 2	Prüfer 3	Prüfer 4
11.09.2018	A	46,17	0,2486	0,1111	BRL2	MEC	RAJ	SCL	STB
12.09.2018	B	31,34	0,2598	0,1127	BRL2	HAM4	HOP	KOI	KOR
13.09.2018	C	29,80	0,2698	0,1127	BRL2	GÜU	RIS2	SCL3	TÄM

Sowohl alle Prüfer, als auch das gesamte Team, erfüllen damit die Anforderungen nach DIN EN 13725.

4.8.3 Geruchsstoffkonzentration

Für die Bestimmung der Geruchsstoffkonzentration wurden 12 Prüfer eingesetzt, die jeweils 10 gültige Schwellenschätzungen zur Bestimmung der Geruchsstoffkonzentration abgeben mussten. Diese 10 Schwellenschätzungen wurden auf jeweils drei Messungen aufgeteilt (vgl. Kapitel 3.2.4.1), sodass sich mit drei Teams insgesamt neun Messungen ergeben. Jede Messung erfüllt die normativen Anforderungen und weist ein $\Delta Z \leq 5$ auf.

Die ermittelten Geruchsstoffkonzentrationen für Essigsäure sind in der folgenden Tabelle 43 zusammengestellt. Die mittlere Geruchsstoffkonzentration der drei Teams liegt bei $12347 \text{ GE}_E/\text{m}^3$.

Tabelle 43: Essigsäure – Geruchsstoffkonzentration nach DIN EN 13725

Einzeldaten für jeden Prüfer und Durchgang, aufgeteilt auf jeweils drei Messungen unter Angabe des geometrischen Gesamtmittelwertes und des oberen und unteren Wertes in Abhängigkeit des 95% Konfidenzintervalls

Prüfer- kürzel / Durch- gang	Geruchsstoffkonzentration in GE _E /m ³											
	SCL	STB	MEC	RAJ	HOP	KOI	HAM 4	KOR	GÜU	TÄM	SCL3	RIS2
	Team A Messung 1				Team B Messung 1				Team C Messung 1			
1	10074	10074	48537	22326	22326	10074	10074	48537	10074	22326	22326	10074
2	4980	10074	22326	22326	22326	4980	10074	22326	10074	22326	22326	10074
3	4980	22326	22326	48537	10074	10074	22326	22326	10074	22326	22326	22326
	Team A Messung 2				Team B Messung 2				Team C Messung 2			
4	22326	10074	22326	22326	22326	4980	4980	10074	4980	10074	10074	10074
5	10074	22326	4980	22326	22326	4980	10074	22326	4980	10074	10074	4980
6	4980	4980	10074	22326	10074	4980	10074	4980	10074	10074	22326	4980
7	10074	4980	10074	22326	10074	4980	4980	22326	22326	10074	10074	22326
	Team A Messung 3				Team B Messung 3				Team C Messung 3			
8	10074	22326	10074	10074	22326	10074	10074	10074	22326	22326	22326	22326
9	4980	10074	10074	22326	22326	4980	4980	10074	22326	22326	10074	4980
10	10074	4980	22326	10074	22326	4980	10074	22326	10074	10074	22326	22326
Gesamtmittelwert (geometrisch)												12347
95% Konfidenzintervall unterer Wert												9480
95% Konfidenzintervall oberer Wert												16080

Die Bewertungen der Geruchsstoffkonzentration sind sowohl innerhalb der Teams als auch teamübergreifend homogen.

4.8.4 Intensitäten und Weber-Fechner-Koeffizient

Aus den Einzelbewertungen der unterschiedlichen Prüfer (siehe Anhang A.1.7) ergibt sich durch die Datenaufbereitung entsprechend Kapitel 3.1.2 die Häufigkeit der Intensitätsüberschreitung bezüglich der zugehörigen logarithmierten Verdünnungszahlen wie in Tabelle 44 dargestellt.

Tabelle 44: Essigsäure – Zuordnung der prozentualen Häufigkeiten der Intensitätsüberschreitungen zu den vorgegebenen Logarithmen der Verdünnungszahlen

logZ / Häufigkeit	4,5	4,2	3,8	3,5	3,3	3,0	2,7	2,4	1,5
$H(I > 0)$	0,17	0,39	0,89	0,89	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00
$H(I > 1)$	0,03	0,06	0,42	0,56	1,00	0,97	0,97	1,00	1,00
$H(I > 2)$	0,00	0,00	0,06	0,31	0,69	0,92	0,89	0,97	1,00
$H(I > 3)$	0,00	0,00	0,00	0,00	0,22	0,42	0,56	0,78	1,00
$H(I > 4)$	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,14	0,17	0,22	0,78
$H(I > 5)$	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,03	0,00	0,06	0,44

Durch Auftragung der Intensitätshäufigkeiten über die logarithmierten Verdünnungszahlen ergeben sich für $H(I > 0)$ bis $H(I > 4)$ fünf einzelne Diagramme, aus denen sich die 16-, 50- und 84-Perzentile $\hat{Z}_{16}$, $\hat{Z}_{50}$ und $\hat{Z}_{84}$ graphisch ableiten lassen (Daten siehe Tabelle 45).

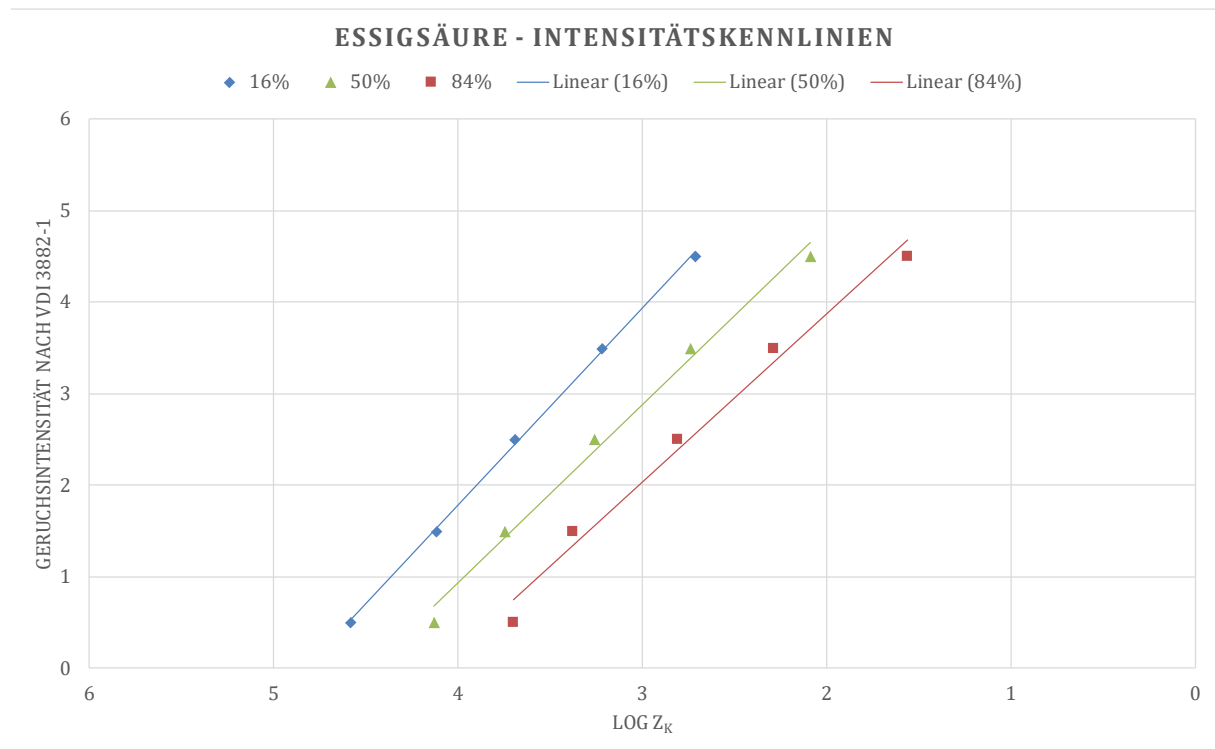
Tabelle 45: Essigsäure – Kenngrößen der Intensitätsstufen I_s

Graphisch ermittelt aus der Auftragung der Häufigkeiten der Intensitätsüberschreitung über die logarithmierten Verdünnungsstufen

I_s	$I = I_s + 0,5$	log Z_{16}	log Z_{50}	log Z_{84}
0	0,5	4,58	4,13	3,70
1	1,5	4,12	3,75	3,38
2	2,5	3,69	3,26	2,81
3	3,5	3,22	2,74	2,29
4	4,5	2,71	2,09	1,56

Durch Auftragung der Daten aus Tabelle 45 ergibt sich die folgende Abbildung 17.

Abbildung 17: Essigsäure – Intensitätskennlinien für $\hat{Z}_{16}$, $\hat{Z}_{50}$ und $\hat{Z}_{84}$ nach VDI 3882-1



Quelle: eigene Darstellung Olfasense GmbH

Die Parameter, die sich für diese Kennlinien ergeben sind in der folgenden Tabelle 46 zusammengestellt.

Tabelle 46: Essigsäure – Parameter der Geradengleichungen der 16-, 50- und 84-Perzentile

Angabe der Korrelationskoeffizienten R, der Bestimmtheitsmaße R² sowie der Steigung b und des Achsenabschnittes a

Parameter	Formelzeichen	◆ 16%	▲ 50%	■ 84%
Korrelationskoeffizient	R	-1,000	-0,995	-0,992
Bestimmtheitsmaß	R ²	0,999	0,991	0,984
Steigung	b	-2,15	-1,95	-1,83
Achsenabschnitt	a	10,39	8,72	7,54

Aus dieser Darstellung lässt sich der Weber-Fechner-Koeffizient mit $k_w = 1,95$ ableiten, sodass sich gemäß Formel (5) in Kapitel 3.1.2 der folgende Zusammenhang für Essigsäure ergibt:

$$I = 1,95 \cdot \log\left(\frac{c_R}{c_{GS}}\right) \quad (16)$$

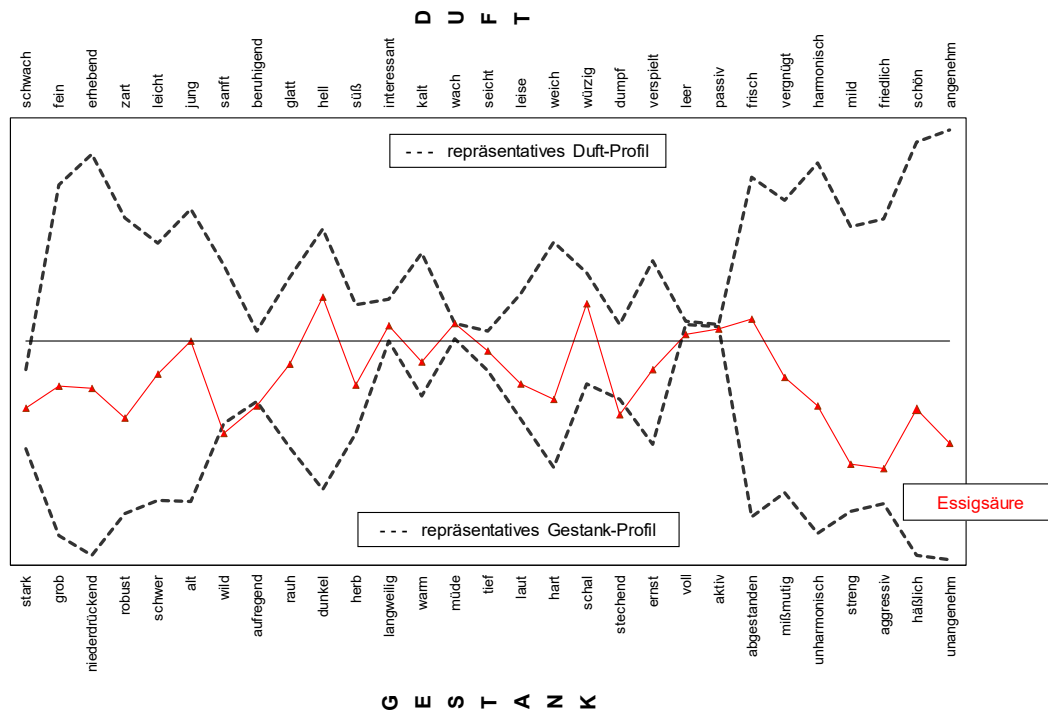
mit:

- I Intensität
- k_W Weber-Fechner-Koeffizient
- c_R Substanzkonzentration in der Riechprobe
- c_{GS} Substanzkonzentration an der Geruchsschwelle

4.8.5 Hedonische Geruchswirkung

Die hedonische Wirkung der Essigsäure ist in Abbildung 18 zusammen mit den repräsentativen Profilen für Duft und Gestank [VDI 3940-4] aufgetragen. Die Bewertung der Essigsäure wurde im Anschluss an die zweite Intensitätsbewertung (Punkt 9 Kapitel 3.2.4.1) vorgenommen, sodass den Prüfern der Geruch gegenwärtig war.

Abbildung 18: Essigsäure – Polaritätenprofil für Essigsäure, Duft und Gestank



repräsentative Profile für Duft und Gestank entsprechend der Daten aus VDI 3940-4

Quelle: Darstellung aus VDI 3940-4; ergänzt um substanzspezifische Daten

Der Produkt-Moment-Korrelationskoeffizient nach Pearson für das Konzept Duft ergibt sich zu -0,26. Für die Korrelation mit dem Konzept Gestank ergibt sich ein Wert von +0,48.

4.8.6 Geruchscharakter

Für die Bewertung des Geruchscharakters wurde Essigsäure mit einer Verdünnung von 1:243 in einen Nalophan®-Beutel überführt und von 5 Prüfern anhand des Charakters bewertet.

Alle 5 Prüfer bewerteten die Geruchsprobe als „stechend“ und „sauer“ und assoziierten sie mit „Essig“.

4.9 Hexanal

4.9.1 Probenaufbereitung

Die Probenaufbereitung wurde entsprechend der folgenden Parameter durchgeführt:

Beutelvolumen:	40 L
Vorbefüllung Probenbeutel:	4 L
Verdampfungstemperatur LiGaVa:	150°C
Substanzmenge injiziert:	1 µL
Flowrate nach Injektion:	1 L/min
Reinheit Substanz:	98%
Dichte Substanz:	0,814 g/cm ³
Aggregatzustand:	flüssig

resultierende rechnerische Konzentration im Mutterbeutel: 19,94 mg/m³

Die Berechnung der Substanzkonzentration wurde entsprechend der Formeln (6) und (7) aus Kapitel 3.2.1 vorgenommen.

Für die Vorversuche und die Darbietung der Proben an die Geruchsprüfer wurde jeweils derselbe 40 L Beutel verwendet.

4.9.2 Beschreibung des Prüferkollektivs

Die Überprüfung zur Erfüllung der in der DIN EN13725 festgelegten Anforderungen zur Bewertung von n-Butanol wurde vor der Probenbewertung durchgeführt. Individuelle Ergebnisse der einzelnen Prüfer sind in Tabelle 47 dargestellt.

Tabelle 47: Hexanal – Prüferüberprüfung nach DIN EN 13725

Anforderungen für die Bewertung von n-Butanol $20 \leq 10^{\bar{y}_{ITE}} \leq 80$ und $10^{s_{ITE}} \leq 2,3$

Team	Prüfer	individuelle Empfindlichkeit $10^{\bar{y}_{ITE}}$ in ppb	individuelle maximale Streuung / Standard-abweichung $10^{s_{ITE}}$ in ppb	Kriterium Empfindlichkeit erfüllt	Kriterium Standard-abweichung erfüllt
A	FIH	46,576	1,629	✓	✓
A	GÖR	36,529	1,367	✓	✓
A	KOR	28,678	1,415	✓	✓
A	SCL3	47,856	1,681	✓	✓
B	BES	45,459	1,435	✓	✓
B	GIJ	37,017	1,642	✓	✓

Team	Prüfer	individuelle Empfindlichkeit 10^{YTE} in ppb	individuelle maximale Streuung / Standard-abweichung 10^{SITE} in ppb	Kriterium Empfindlichkeit erfüllt	Kriterium Standard-abweichung erfüllt
B	MEC	41,982	1,408	✓	✓
B	TÄM	25,369	1,406	✓	✓
C	BRL2	45,751	1,499	✓	✓
C	HAM4	42,154	1,514	✓	✓
C	LEJ	39,528	1,789	✓	✓
C	STB	36,778	1,700	✓	✓

Die Ergebnisse der drei Teams sind in Tabelle 48 zusammengestellt.

Tabelle 48: Hexanal – Geruchsempfindlichkeit der Teams auf n-Butanol nach DIN EN 13725

Datum	Team	Empfindlichkeit in ppb	Präzision $r \leq 0,477$	Genauigkeit $A \leq 0,217$	Mess-leiter	Prüfer 1	Prüfer 2	Prüfer 3	Prüfer 4
19.09.2018	A	48,51	0,2748	0,1219	BRL2	FIH	GÖR	KOR	SCL3
20.09.2018	B	34,91	0,2850	0,1133	BRL2	BES	GIJ	MEC	TÄM
21.09.2018	C	55,03	0,2869	0,1146	BES	BRL2	HAM4	LEJ	STB

Sowohl alle Prüfer, als auch das gesamte Team, erfüllen damit die Anforderungen nach DIN EN 13725.

4.9.3 Geruchsstoffkonzentration

Für die Bestimmung der Geruchsstoffkonzentration wurden 12 Prüfer eingesetzt, die jeweils 10 gültige Schwellenschätzungen zur Bestimmung der Geruchsstoffkonzentration abgeben mussten. Diese 10 Schwellenschätzungen wurden auf jeweils drei Messungen aufgeteilt (vgl. Kapitel 3.2.4.1), sodass sich mit drei Teams insgesamt neun Messungen ergeben. Jede Messung erfüllt die normativen Anforderungen und weist ein $\Delta Z \leq 5$ auf.

Die ermittelten Geruchsstoffkonzentrationen für Hexanal sind in der folgenden Tabelle 49 zusammengestellt. Die mittlere Geruchsstoffkonzentration der drei Teams liegt bei $6406 \text{ GE}_E/\text{m}^3$.

Tabelle 49: Hexanal – Geruchsstoffkonzentration nach DIN EN 13725

Einzeldaten für jeden Prüfer und Durchgang, aufgeteilt auf jeweils drei Messungen unter Angabe des geometrischen Gesamtmittelwertes und des oberen und unteren Wertes in Abhängigkeit des 95% Konfidenzintervalls

Prüfer- kürzel / Durch- gang	Geruchsstoffkonzentration in GE _E /m ³											
	KOR	FIH	GÖR	SCL3	BES	MEC	GIJ	TÄM	BRL2	STB	HAM 4	LEJ
	Team A Messung 1				Team B Messung 1				Team C Messung 1			
1	11271	1355	11271	2782	10074	4980	10074	22326	11271	5604	11271	2782
2	11271	2782	11271	5604	4980	4980	4980	4980	11271	5604	5604	11271
3	11271	5604	23790	11271	4980	4980	4980	4980	11271	2782	5604	5604
	Team A Messung 2				Team B Messung 2				Team C Messung 2			
4	11271	2782	5604	2782	10074	4980	10074	22326	5604	2782	5604	5604
5	11271	2782	5604	11271	10074	4980	4980	10074	2782	2782	5604	11271
6	11271	2782	11271	2782	10074	10074	4980	10074	5604	1355	11271	11271
7	11271	1355	5604	11271	4980	4980	4980	4980	5604	2782	2782	11271
	Team A Messung 3				Team B Messung 3				Team C Messung 3			
8	11271	5604	11271	11271	10074	10074	2654	10074	5604	2782	23790	5604
9	11271	2782	11271	11271	22326	4980	4980	4980	2782	5604	2782	23790
10	11271	2782	2782	5604	4980	4980	4980	10074	11271	5604	5604	11271
Gesamtmittelwert (geometrisch)												6406
95% Konfidenzintervall unterer Wert												4919
95% Konfidenzintervall oberer Wert												8343

Die Bewertungen der Geruchsstoffkonzentration sind sowohl innerhalb der Teams als auch teamübergreifend homogen.

4.9.4 Intensitäten und Weber-Fechner-Koeffizient

Aus den Einzelbewertungen der eingesetzten Prüfer (siehe Anhang A.1.8) ergibt sich durch die Datenaufbereitung entsprechend Kapitel 3.1.2 die Häufigkeit der Intensitätsüberschreitung bezüglich der zugehörigen logarithmierten Verdünnungszahlen wie in Tabelle 50 dargestellt.

Tabelle 50: Hexanal – Zuordnung der Häufigkeiten der Intensitätsüberschreitungen zu den vorgegebenen Logarithmen der Verdünnungszahlen

log Z / Häufigkeit	4,5	4,2	3,9	3,6	3,3	3,0	2,7	2,2
$H(I > 0)$	0,14	0,39	0,72	0,94	1,00	1,00	1,00	1,00
$H(I > 1)$	0,00	0,00	0,22	0,53	0,92	1,00	1,00	1,00
$H(I > 2)$	0,00	0,00	0,00	0,08	0,64	0,97	1,00	1,00
$H(I > 3)$	0,00	0,00	0,00	0,00	0,14	0,56	0,75	1,00
$H(I > 4)$	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,19	0,22	0,97
$H(I > 5)$	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,06	0,56

Durch Auftragung der Intensitätshäufigkeiten über die logarithmierten Verdünnungszahlen ergeben sich für $H(I > 0)$ bis $H(I > 4)$ fünf einzelne Diagramme, aus denen sich die 16-, 50- und 84-Perzentile $\hat{Z}_{16}$, $\hat{Z}_{50}$ und $\hat{Z}_{84}$ graphisch ableiten lassen (siehe Tabelle 51).

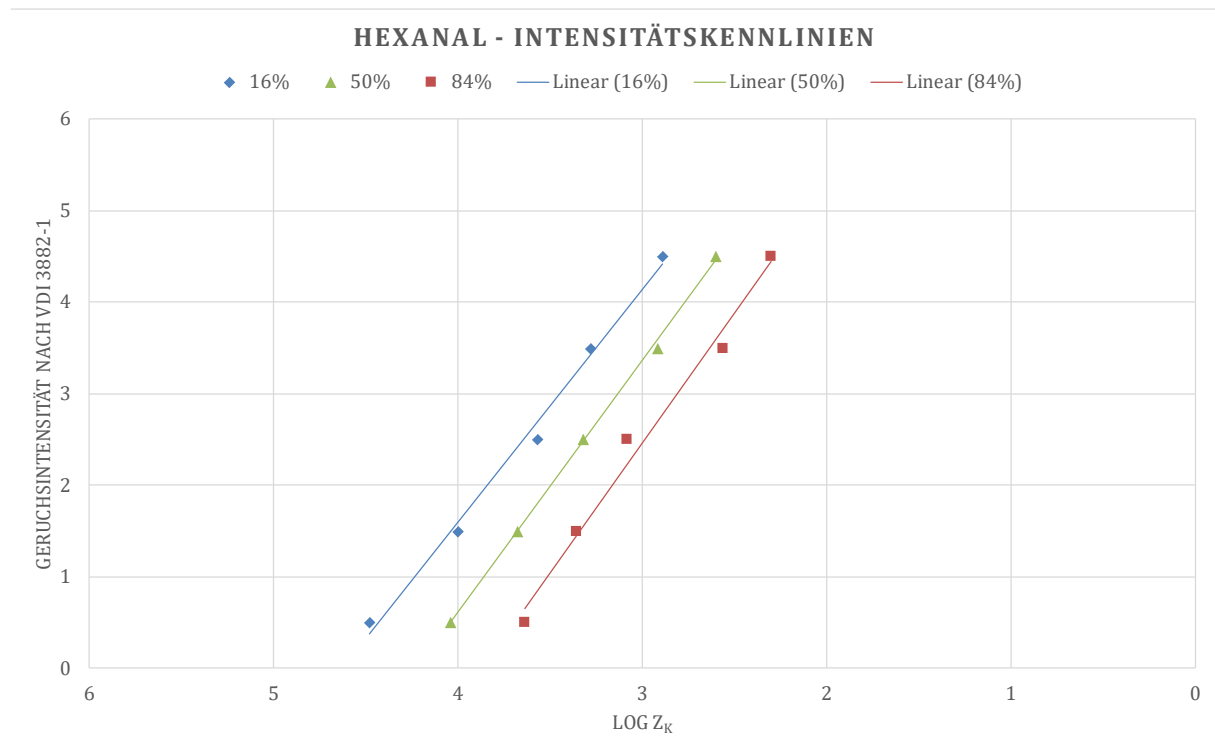
Tabelle 51: Hexanal – Kenngrößen der Intensitätsstufen I_s

Graphisch ermittelt aus der Auftragung der Häufigkeiten der Intensitätsüberschreitung über die logarithmierten Verdünnungsstufen

I_s	$I = I_s + 0,5$	log Z_{16}	log Z_{50}	log Z_{84}
0	0,5	4,48	4,04	3,64
1	1,5	4,00	3,68	3,36
2	2,5	3,57	3,32	3,08
3	3,5	3,28	2,92	2,56
4	4,5	2,89	2,60	2,30

Durch Auftragung der Daten aus Tabelle 51 ergibt sich die folgende Abbildung 19.

Abbildung 19: Hexanal – Intensitätskennlinien für $\hat{Z}_{16}$, $\hat{Z}_{50}$ und $\hat{Z}_{84}$ nach VDI 3882-1



Quelle: eigene Darstellung Olfasense GmbH

Die Parameter, die sich für diese Kennlinien ergeben sind in der folgenden Tabelle 52 zusammengestellt.

Tabelle 52: Hexanal – Parameter der Geradengleichungen der 16-, 50- und 84-Perzentile

Angabe der Korrelationskoeffizienten R, der Bestimmtheitsmaße R^2 sowie der Steigung b und des Achsenabschnittes a

Parameter	Formelzeichen	◆ 16%	▲ 50%	■ 84%
Korrelationskoeffizient	R	-0,996	-1,000	-0,993
Bestimmtheitsmaß	R^2	0,993	0,999	0,986
Steigung	b	-2,55	-2,74	-2,83
Achsenabschnitt	a	11,78	11,59	10,96

Aus dieser Darstellung lässt sich der Weber-Fechner-Koeffizient mit $k_w = 2,74$ ableiten, sodass sich gemäß Formel (5) in Kapitel 3.1.2 der folgende Zusammenhang für Hexanal ergibt:

$$I = 2,74 \cdot \log\left(\frac{c_R}{c_{GS}}\right) \quad (17)$$

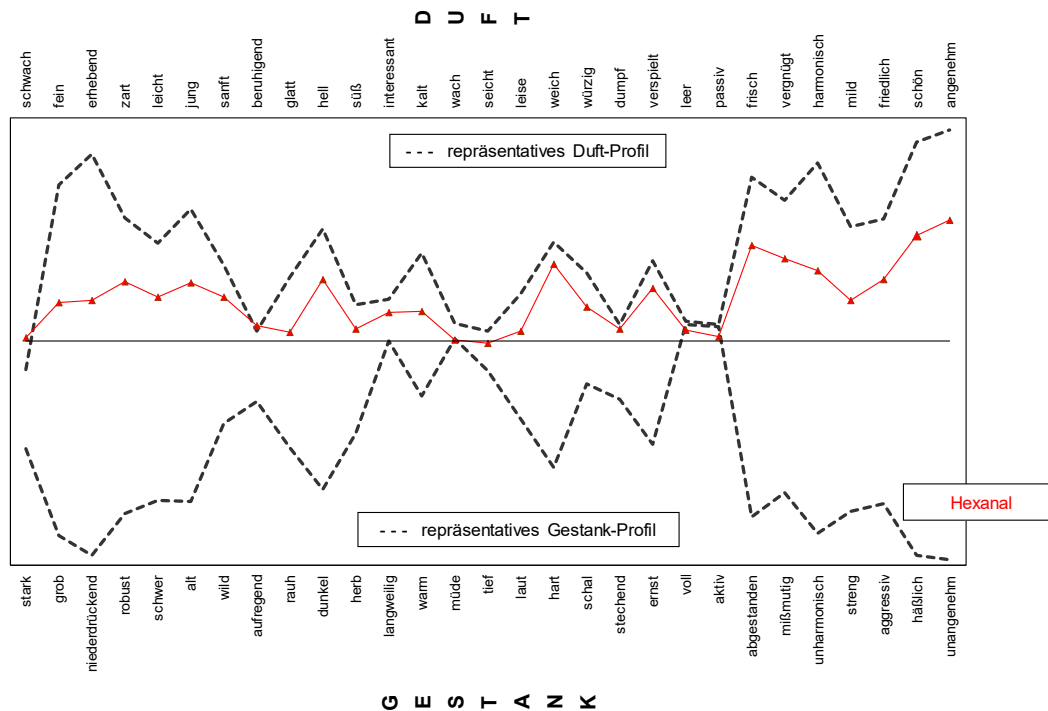
mit:

- I Intensität
- k_W Weber-Fechner-Koeffizient
- c_R Substanzkonzentration in der Riechprobe
- c_{GS} Substanzkonzentration an der Geruchsschwelle

4.9.5 Hedonische Geruchswirkung

Die hedonische Wirkung von Hexanal ist in Abbildung 20 zusammen mit den repräsentativen Profilen für Duft und Gestank [VDI 3940-4] aufgetragen. Die Bewertung von Hexanal wurde im Anschluss an die zweite Intensitätsbewertung (Punkt 9 Kapitel 3.2.4.1) vorgenommen, sodass den Prüfern der Geruch gegenwärtig war.

Abbildung 20: Hexanal – Polaritätenprofil für Hexanal, Duft und Gestank



repräsentative Profile für Duft und Gestank entsprechend der Daten aus VDI 3940-4

Quelle: Darstellung aus VDI 3940-4; ergänzt um substanzspezifische Daten

Der Produkt-Moment-Korrelationskoeffizient nach Pearson für das Konzept Duft ergibt sich zu +0,87. Für die Korrelation mit dem Konzept Gestank ergibt sich ein Wert von -0,75.

4.9.6 Geruchscharakter

Für die Bewertung des Geruchscharakters wurde Hexanal mit einer Verdünnung von 1:722 in einen Nalophan®-Beutel überführt und von 5 Prüfern anhand des Charakters bewertet.

Alle 5 Prüfer beschrieben die Geruchsprobe als „grün“. Vier Prüfer empfanden die Probe weiterhin als „grasig“ und „fettig“. Weitere Beschreibungen waren „blumig“ und „süßlich“.

4.10 Nonanal

4.10.1 Probenaufbereitung

Die Probenaufbereitung wurde entsprechend der folgenden Parameter durchgeführt:

Beutelvolumen:	60 L
Vorbefüllung Probenbeutel:	6 L
Verdampfungstemperatur LiGaVa:	220°C
Substanzmenge injiziert:	1 µL
Flowrate nach Injektion:	1 L/min
Reinheit Substanz:	95%
Dichte Substanz:	0,826 g/cm ³
Aggregatzustand:	flüssig

resultierende rechnerische Konzentration im Mutterbeutel: 13,08 mg/m³

Die Berechnung der Substanzkonzentration wurde entsprechend der Formeln (6) und (7) aus Kapitel 3.2.1 vorgenommen.

Für die Vorversuche und die Darbietung der Proben an die Geruchsprüfer wurde jeweils derselbe 60 L Beutel verwendet.

4.10.2 Beschreibung des Prüferkollektivs

Die Überprüfung zur Erfüllung der in der DIN EN 13725 festgelegten Anforderungen zur Bewertung von n-Butanol wurde vor der Probenbewertung durchgeführt. Individuelle Ergebnisse der einzelnen Prüfer sind in Tabelle 53 dargestellt.

Tabelle 53: Nonanal – Prüferüberprüfung nach DIN EN 13725

Anforderungen für die Bewertung von n-Butanol $20 \leq 10^{\bar{y}_{ITE}} \leq 80$ und $10^{s_{ITE}} \leq 2,3$

Team	Prüfer	individuelle Empfindlichkeit $10^{\bar{y}_{ITE}}$ in ppb	individuelle maximale Streuung / Standard-abweichung $10^{s_{ITE}}$ in ppb	Kriterium Empfindlichkeit erfüllt	Kriterium Standard-abweichung erfüllt
A	STB	40,531	1,612	✓	✓
A	GIJ	35,744	1,575	✓	✓
A	KOR	27,227	1,382	✓	✓
A	TÄM	25,160	1,378	✓	✓
B	ELS	51,483	1,425	✓	✓
B	SCL	64,117	1,345	✓	✓

Team	Prüfer	individuelle Empfindlichkeit 10^{YTE} in ppb	individuelle maximale Streuung / Standard-abweichung 10^{SITE} in ppb	Kriterium Empfindlichkeit erfüllt	Kriterium Standard-abweichung erfüllt
B	HAM4	46,918	1,355	✓	✓
B	MEC	41,890	1,377	✓	✓
C	MAF	31,235	1,345	✓	✓
C	KOI	55,486	1,384	✓	✓
C	RAJ	26,007	1,734	✓	✓
C	MAE	64,808	1,594	✓	✓

Die Ergebnisse der drei Teams sind in Tabelle 54 zusammengestellt.

Tabelle 54: Nonanal – Geruchsempfindlichkeit der Teams auf n-Butanol nach DIN EN 13725

Untertitel [wenn nicht notwendig, bitte entfernen]

Datum	Team	Empfindlichkeit in ppb	Präzision $r \leq 0,477$	Genauigkeit $A \leq 0,217$	Mess-leiter	Prüfer 1	Prüfer 2	Prüfer 3	Prüfer 4
26.09.2018	A	31,00	0,3097	0,1085	BES	STB	GIJ	KOR	TÄM
27.09.2018	B	55,03	0,3136	0,1156	BES	ELS	SCL	HAM4	MEC
28.09.2018	C	36,87	0,3196	0,1136	BES	MAF	KOI	RAJ	MAE

Sowohl alle Prüfer, als auch das gesamte Team, erfüllen damit die Anforderungen nach DIN EN 13725.

4.10.3 Geruchsstoffkonzentration

Für die Bestimmung der Geruchsstoffkonzentration wurden 12 Prüfer eingesetzt, die jeweils 10 gültige Schwellenschätzungen zur Bestimmung der Geruchsstoffkonzentration abgeben mussten. Diese 10 Schwellenschätzungen wurden auf jeweils drei Messungen aufgeteilt (vgl. Kapitel 3.2.4.1), sodass sich mit drei Teams insgesamt neun Messungen ergeben. Jede Messung erfüllte die normativen Anforderungen und wies ein $\Delta Z \leq 5$ auf.

Die ermittelten Geruchsstoffkonzentrationen für Nonanal sind in der folgenden Tabelle 55 zusammengestellt. Die mittlere Geruchsstoffkonzentration der drei Teams liegt bei $4841 \text{ GE}_E/\text{m}^3$.

Tabelle 55: Nonanal – Geruchsstoffkonzentration nach DIN EN 13725

Einzeldaten für jeden Prüfer und Durchgang, aufgeteilt auf jeweils drei Messungen unter Angabe des geometrischen Gesamtmittelwertes und des oberen und unteren Wertes in Abhängigkeit des 95% Konfidenzintervalls

Prüfer- kürzel / Durch- gang	Geruchsstoffkonzentration in GE _E /m ³											
	STB	GIJ	KOR	TÄM	ELS	SCL	HAM 4	MEC	MAF	KOI	RAJ	MAE
	Team A Messung 1				Team B Messung 1				Team C Messung 1			
1	2782	2782	11271	5604	5604	5604	5604	11271	2782	5604	11271	5604
2	2782	2782	11271	2782	2782	5604	11271	11271	2782	2782	5604	5604
3	2782	2782	11271	5604	2782	5604	5604	5604	5604	2782	5604	2782
	Team A Messung 2				Team B Messung 2				Team C Messung 2			
4	2782	2782	11271	5604	5604	5604	11271	11271	11271	2782	5604	5604
5	2782	2782	5604	11271	5604	5604	5604	5604	11271	2782	5604	5604
6	2782	2782	5604	5604	5604	5604	5604	5604	5604	2782	5604	5604
7	2782	2782	11271	11271	2782	5604	5604	11271	5604	1355	2782	2782
	Team A Messung 3				Team B Messung 3				Team C Messung 3			
8	2782	2782	11271	5604	2782	2782	5604	11271	5604	2782	2782	5604
9	5604	2782	5604	5604	2782	2782	5604	11271	11271	2782	2782	5604
10	2782	2782	5604	5604	2782	2782	5604	5604	5604	5604	5604	5604
Gesamtmittelwert (geometrisch)												4841
95% Konfidenzintervall unterer Wert												3717
95% Konfidenzintervall oberer Wert												6305

Die Bewertungen der Geruchsstoffkonzentration sind sowohl innerhalb der Teams als auch teamübergreifend homogen.

4.10.4 Intensitäten und Weber-Fechner-Koeffizient

Aus den Einzelbewertungen der eingesetzten Prüfer (siehe Anhang A.1.9) ergibt sich durch die Datenaufbereitung entsprechend Kapitel 3.1.2 die Häufigkeit der Intensitätsüberschreitung bezüglich der zugehörigen logarithmierten Verdünnungszahlen wie in Tabelle 56 dargestellt.

Tabelle 56: Nonanal – Zuordnung der Häufigkeiten der Intensitätsüberschreitungen zu den vorgegebenen Logarithmen der Verdünnungszahlen

log Z / Häufigkeit	4,2	3,9	3,6	3,3	3	2,7	2,4	2,2
$H(I > 0)$	0,00	0,53	0,72	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00
$H(I > 1)$	0,00	0,00	0,17	0,86	1,00	1,00	1,00	1,00
$H(I > 2)$	0,00	0,00	0,00	0,31	0,89	1,00	1,00	1,00
$H(I > 3)$	0,00	0,00	0,00	0,00	0,14	0,83	1,00	1,00
$H(I > 4)$	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,08	0,56	0,89
$H(I > 5)$	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,06	0,17

Durch Auftragung der Intensitätshäufigkeiten über die logarithmierten Verdünnungszahlen ergeben sich für $H(I > 0)$ bis $H(I > 4)$ fünf einzelne Diagramme, aus denen sich die 16-, 50- und 84-Perzentile $\hat{Z}_{16}$, $\hat{Z}_{50}$ und $\hat{Z}_{84}$ graphisch ableiten lassen (siehe Tabelle 57).

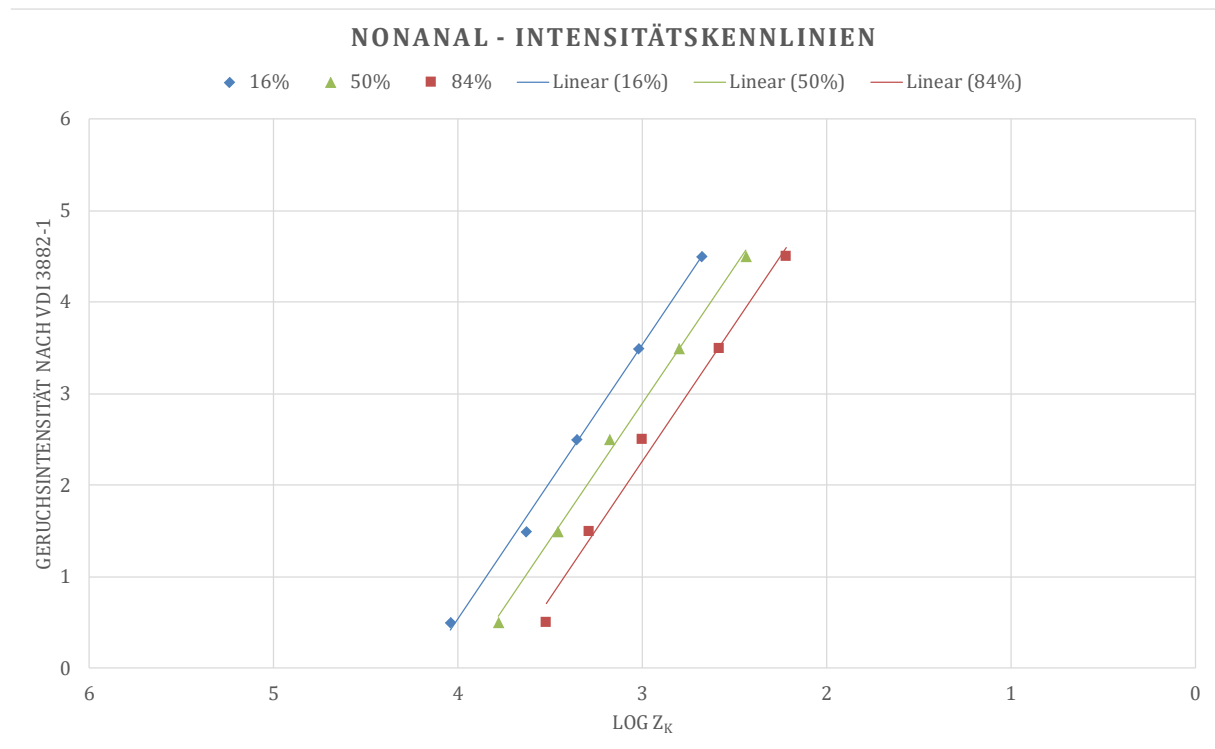
Tabelle 57: Nonanal – Kenngrößen der Intensitätsstufen I_s

Graphisch ermittelt aus der Auftragung der Häufigkeiten der Intensitätsüberschreitung über die logarithmierten Verdünnungsstufen

I_s	$I = I_s + 0,5$	log Z_{16}	log Z_{50}	log Z_{84}
0	0,5	4,04	3,78	3,52
1	1,5	3,63	3,46	3,29
2	2,5	3,36	3,18	3,00
3	3,5	3,02	2,80	2,58
4	4,5	2,68	2,44	2,22

Durch Auftragung der Daten aus Tabelle 57 ergibt sich die folgende Abbildung 21.

Abbildung 21: Nonanal – Intensitätskennlinien für $\hat{Z}_{16}$, $\hat{Z}_{50}$ und $\hat{Z}_{84}$ nach VDI 3882-1



Quelle: eigene Darstellung Olfasense GmbH

Die Parameter, die sich für diese Kennlinien ergeben sind in der folgenden Tabelle 58 zusammengestellt.

Tabelle 58: Nonanal – Parameter der Geradengleichungen der 16-, 50- und 84-Perzentile

Angabe der Korrelationskoeffizienten R, der Bestimmtheitsmaße R² sowie der Steigung b und des Achsenabschnittes a

Parameter	Formelzeichen	◆ 16%	▲ 50%	■ 84%
Korrelationskoeffizient	R	-0,998	-0,999	-0,994
Bestimmtheitsmaß	R ²	0,997	0,997	0,988
Steigung	b	-2,99	-2,99	-2,98
Achsenabschnitt	a	12,52	11,85	11,22

Aus dieser Darstellung lässt sich der Weber-Fechner-Koeffizient mit $k_w = 2,99$ ableiten, sodass sich gemäß Formel (5) in Kapitel 3.1.2 der folgende Zusammenhang für Nonanal ergibt:

$$I = 2,99 \cdot \log\left(\frac{c_R}{c_{GS}}\right) \quad (18)$$

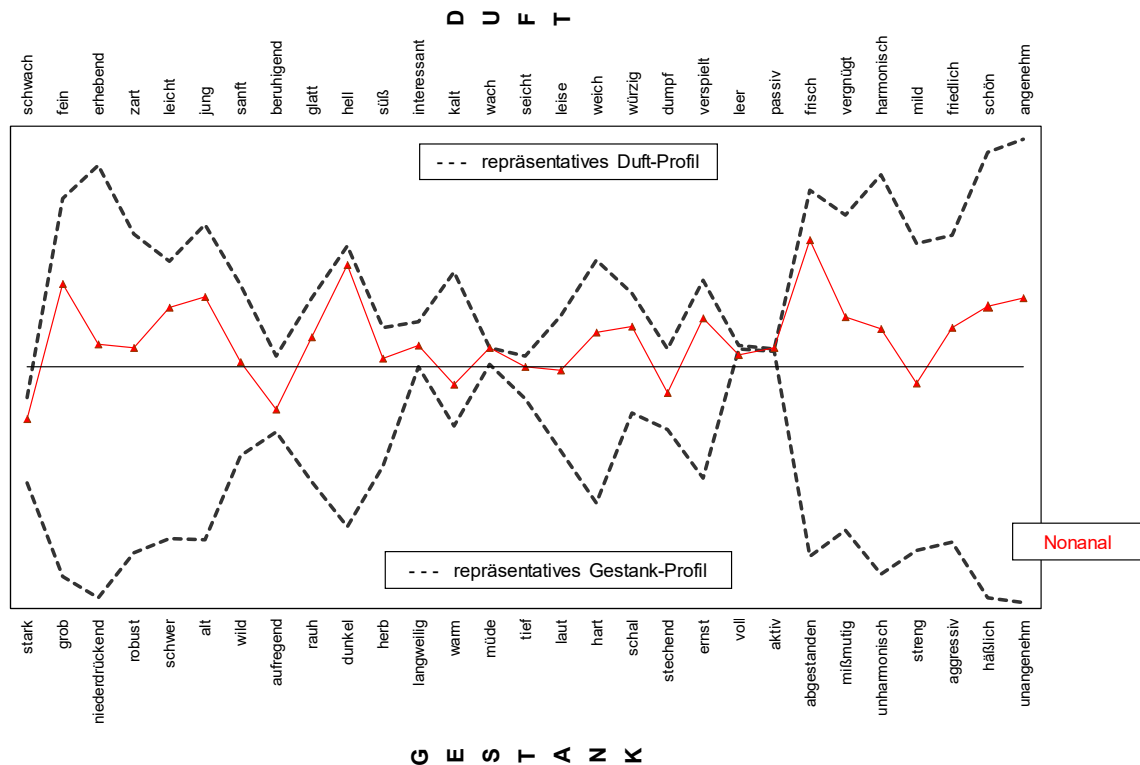
mit:

- I Intensität
- k_W Weber-Fechner-Koeffizient
- c_R Substanzkonzentration in der Riechprobe
- c_{GS} Substanzkonzentration an der Geruchsschwelle

4.10.5 Hedonische Geruchswirkung

Die hedonische Wirkung des Nonanals ist in Abbildung 22 zusammen mit den repräsentativen Profilen für Duft und Gestank [VDI 3940-4] aufgetragen. Die Bewertung des Nonanals wurde im Anschluss an die zweite Intensitätsbewertung (Punkt 9 Kapitel 3.2.4.1) vorgenommen, sodass den Prüfern der Geruch gegenwärtig war.

Abbildung 22: Nonanal – Polaritätenprofil für Nonanal, Duft und Gestank



repräsentative Profile für Duft und Gestank entsprechend der Daten aus VDI 3940-4

Quelle: Darstellung aus VDI 3940-4; ergänzt um substanzspezifische Daten

Der Produkt-Moment-Korrelationskoeffizient nach Pearson für das Konzept Duft ergibt sich zu +0,67. Für die Korrelation mit dem Konzept Gestank ergibt sich ein Wert von -0,50.

4.10.6 Geruchscharakter

Für die Bewertung des Geruchscharakters wurde Nonanal mit einer Verdünnung von 1:139 in einen Nalophan®-Beutel überführt und von 5 Prüfern anhand des Charakters bewertet.

Während alle 5 Prüfer die Geruchssprobe als „zitrusartig“ beschrieben, wurde sie weiterhin je drei Mal als „grün“ und „frisch“ beschrieben. Weitere Assoziationen waren „WC-Stein“, „fettig“, „seifig“ und „künstlich“.

4.11 m-Kresol

4.11.1 Probenaufbereitung

Die Probenaufbereitung wurde entsprechend der folgenden Parameter durchgeführt:

Beutelvolumen:	150 L
Vorbefüllung Probenbeutel:	15 L
Verdampfungstemperatur LiGaVa:	220°C
Substanzmenge injiziert:	0,4 µL
Flowrate nach Injektion:	1 L/min
Reinheit Substanz:	99%
Dichte Substanz:	1,034 g/cm ³
Aggregatzustand:	flüssig

resultierende rechnerische Konzentration im Mutterbeutel: 2,73 mg/m³

Die Berechnung der Substanzkonzentration wurde entsprechend der Formeln (6) und (7) aus Kapitel 3.2.1 vorgenommen.

Für die Vorversuche und die Darbietung der Proben an die Geruchsprüfer wurde jeweils derselbe 150 L Beutel verwendet.

4.11.2 Beschreibung des Prüferkollektivs

Die Überprüfung zur Erfüllung der in der DIN EN13725 festgelegten Anforderungen zur Bewertung von n-Butanol wurde vor der Probenbewertung durchgeführt. Individuelle Ergebnisse der einzelnen Prüfer sind in Tabelle 59 dargestellt.

Tabelle 59: m-Kresol – Prüferüberprüfung nach DIN EN 13725

Anforderungen für die Bewertung von n-Butanol $20 \leq 10^{\bar{y}_{ITE}} \leq 80$ und $10^{s_{ITE}} \leq 2,3$

Team	Prüfer	individuelle Empfindlichkeit $10^{\bar{y}_{ITE}}$ in ppb	individuelle maximale Streuung / Standard-abweichung $10^{s_{ITE}}$ in ppb	Kriterium Empfindlichkeit erfüllt	Kriterium Standard-abweichung erfüllt
A	FIH	44,903	1,651	✓	✓
A	KOR	28,977	1,510	✓	✓
A	PEL	50,111	1,511	✓	✓
A	SCL	63,202	1,398	✓	✓
B	DÖC	43,413	1,595	✓	✓
B	ELS	47,793	1,434	✓	✓

Team	Prüfer	individuelle Empfindlichkeit 10^{YTE} in ppb	individuelle maximale Streuung / Standardabweichung 10^{SITE} in ppb	Kriterium Empfindlichkeit erfüllt	Kriterium Standardabweichung erfüllt
B	LEJ	39,296	1,723	✓	✓
B	RAJ	31,396	1,670	✓	✓
C	HAM4	39,495	1,477	✓	✓
C	JOA	41,798	1,551	✓	✓
C	STB	40,151	1,607	✓	✓
C	SÜM	55,609	1,373	✓	✓

Die Ergebnisse der drei Teams sind in Tabelle 60 zusammengestellt.

Tabelle 60: m-Kresol – Geruchsempfindlichkeit der Teams auf n-Butanol nach DIN EN 13725

Datum	Team	Empfindlichkeit in ppb	Präzision $r \leq 0,477$	Genauigkeit $A \leq 0,217$	Messleiter	Prüfer 1	Prüfer 2	Prüfer 3	Prüfer 4
18.10.2018	A	43,86	0,2649	0,0770	BRL2	FIH	KOR	PEL	SCL
19.10.2018	B	34,73	0,2700	0,0705	BES	DÖC	ELS	LEJ	RAJ
22.10.2018	C	34,73	0,2703	0,0705	BRL2	HAM4	JOA	STB	SÜM

Sowohl alle Prüfer, als auch das gesamte Team, erfüllen damit die Anforderungen nach DIN EN 13725.

4.11.3 Geruchsstoffkonzentration

Für die Bestimmung der Geruchsstoffkonzentration wurden 12 Prüfer eingesetzt, die jeweils 10 gültige Schwellenschätzungen zur Bestimmung der Geruchsstoffkonzentration abgeben mussten. Diese 10 Schwellenschätzungen wurden auf jeweils drei Messungen aufgeteilt (vgl. Kapitel 3.2.4.1), sodass sich mit drei Teams insgesamt neun Messungen ergeben. Jede Messung erfüllte die normativen Anforderungen und wies ein $\Delta Z \leq 5$ auf.

Die ermittelten Geruchsstoffkonzentrationen für m-Kresol sind in der folgenden Tabelle 61 zusammengestellt. Die mittlere Geruchsstoffkonzentration der drei Teams liegt bei $9742 \text{ GE}_E/\text{m}^3$.

Tabelle 61: m-Kresol – Geruchsstoffkonzentration nach DIN EN 13725

Einzeldaten für jeden Prüfer und Durchgang, aufgeteilt auf jeweils drei Messungen unter Angabe des geometrischen Gesamtmittelwertes und des oberen und unteren Wertes in Abhängigkeit des 95% Konfidenzintervalls

Prüfer- kürzel / Durch- gang	Geruchsstoffkonzentration in GE _E /m ³											
	FIH	PEL	KOR	SCL	LEJ	RAJ	ELS	DÖC	STB	HAM 4	JOA	SÜM
	Team A Messung 1				Team B Messung 1				Team C Messung 1			
1	23790	11271	49691	23790	23790	23790	49691	23790	49691	23790	49691	5604
2	23790	11271	11271	5604	23790	23790	49691	23790	23790	49691	23790	5604
3	11271	11271	49691	11271	11271	23790	11271	5604	23790	49691	11271	11271
	Team A Messung 2				Team B Messung 2				Team C Messung 2			
4	5604	23790	23790	2782	5604	11271	5604	23790	23790	23790	11271	5604
5	23790	5604	11271	2782	11271	5604	5604	23790	11271	23790	11271	2782
6	2782	5604	23790	2782	11271	5604	5604	11271	11271	23790	5604	5604
7	2782	2782	23790	2782	5604	23790	5604	23790	5604	11271	11271	11271
	Team A Messung 3				Team B Messung 3				Team C Messung 3			
8	5604	2782	5604	2782	5604	5604	5604	5604	2782	11271	11271	5604
9	5604	1355	11271	1355	5604	5604	2782	23790	23790	5604	5604	2782
10	5604	2782	11271	2782	5604	5604	5604	5604	23790	11271	5604	5604
Gesamtmittelwert (geometrisch)												9742
95% Konfidenzintervall unterer Wert												7480
95% Konfidenzintervall oberer Wert												12688

Die Geruchsstoffkonzentrationen weisen von der ersten zur dritten Messung eine deutliche Abnahme von durchschnittlich 19391 GE_E/m³ auf 5618GE_E/m³ auf, was etwa 1,5 Verdünnungsstufen entspricht. Da sich eine Reduzierung der Konzentration von m-Kresol nicht durch analytische Daten bestätigen lässt (vgl. Tabelle 127 in Kapitel 5.1), ist von starken Adaptationseffekten bei diesem Geruchsstoff auszugehen.

4.11.4 Intensitäten und Weber-Fechner-Koeffizient

Aus den Einzelbewertungen der eingesetzten Prüfer (siehe Anhang A.1.10) ergibt sich durch die Datenaufbereitung entsprechend Kapitel 3.1.2 die Häufigkeit der Intensitätsüberschreitung bezüglich der zugehörigen logarithmierten Verdünnungszahlen wie in Tabelle 62 dargestellt.

Tabelle 62: m-Kresol – Zuordnung der Häufigkeiten der Intensitätsüberschreitungen zu den vorgegebenen Logarithmen der Verdünnungszahlen

log Z / Häufigkeit	4,8	4,5	4,2	3,9	3,6	3,3	3,0	2,7	2,4
$H(I > 0)$	0,25	0,19	0,33	0,92	0,97	1,00	1,00	1,00	1,00
$H(I > 1)$	0,00	0,03	0,00	0,39	0,56	1,00	1,00	1,00	1,00
$H(I > 2)$	0,00	0,00	0,00	0,03	0,08	0,50	0,89	1,00	1,00
$H(I > 3)$	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,06	0,44	0,56	1,00
$H(I > 4)$	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,08	0,11	0,63
$H(I > 5)$	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,06	0,09

Durch Auftragung der Intensitätshäufigkeiten über die logarithmierten Verdünnungszahlen ergeben sich für $H(I > 0)$ bis $H(I > 4)$ fünf einzelne Diagramme, aus denen sich die 16-, 50- und 84-Perzentile $\hat{Z}_{16}$, $\hat{Z}_{50}$ und $\hat{Z}_{84}$ graphisch ableiten lassen (siehe Tabelle 63).

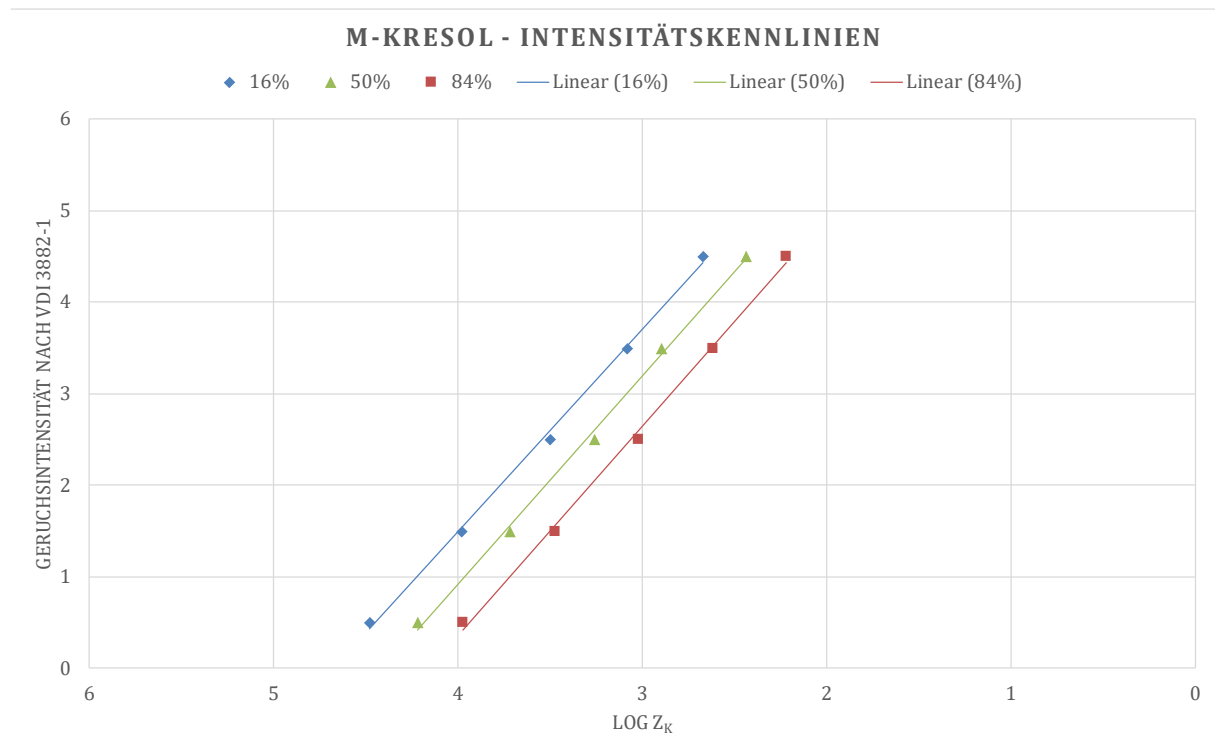
Tabelle 63: m-Kresol – Kenngrößen der Intensitätsstufen I_s

Graphisch ermittelt aus der Auftragung der Häufigkeiten der Intensitätsüberschreitung über die logarithmierten Verdünnungsstufen

I_s	$I = I_s + 0,5$	log Z_{16}	log Z_{50}	log Z_{84}
0	0,5	4,48	4,22	3,97
1	1,5	3,98	3,72	3,47
2	2,5	3,50	3,26	3,02
3	3,5	3,08	2,90	2,62
4	4,5	2,67	2,44	2,22

Durch Auftragung der Daten aus Tabelle 63 ergibt sich die folgende Abbildung 23.

Abbildung 23: m-Kresol – Intensitätskennlinien für Ž16, Ž50 und Ž84 nach VDI 3882-1



Quelle: eigene Darstellung Olfasense GmbH

Die Parameter, die sich für diese Kennlinien ergeben sind in der folgenden Tabelle 64 zusammengestellt.

Tabelle 64: m-Kresol – Parameter der Geradengleichungen der 16-, 50- und 84-Perzentile

Angabe der Korrelationskoeffizienten R, der Bestimmtheitsmaße R² sowie der Steigung b und des Achsenabschnittes a

Parameter	Formelzeichen	◆ 16%	▲ 50%	■ 84%
Korrelationskoeffizient	R	-0,999	-0,999	-0,999
Bestimmtheitsmaß	R ²	0,998	0,997	0,997
Steigung	b	-2,21	-2,28	-2,29
Achsenabschnitt	a	10,32	10,03	9,52

Aus dieser Darstellung lässt sich der Weber-Fechner-Koeffizient mit k_w = 2,28 ableiten, sodass sich gemäß Formel (5) in Kapitel 3.1.2 der folgende Zusammenhang für m-Kresol ergibt:

$$I = 2,28 \cdot \log\left(\frac{c_R}{c_{GS}}\right) \quad (19)$$

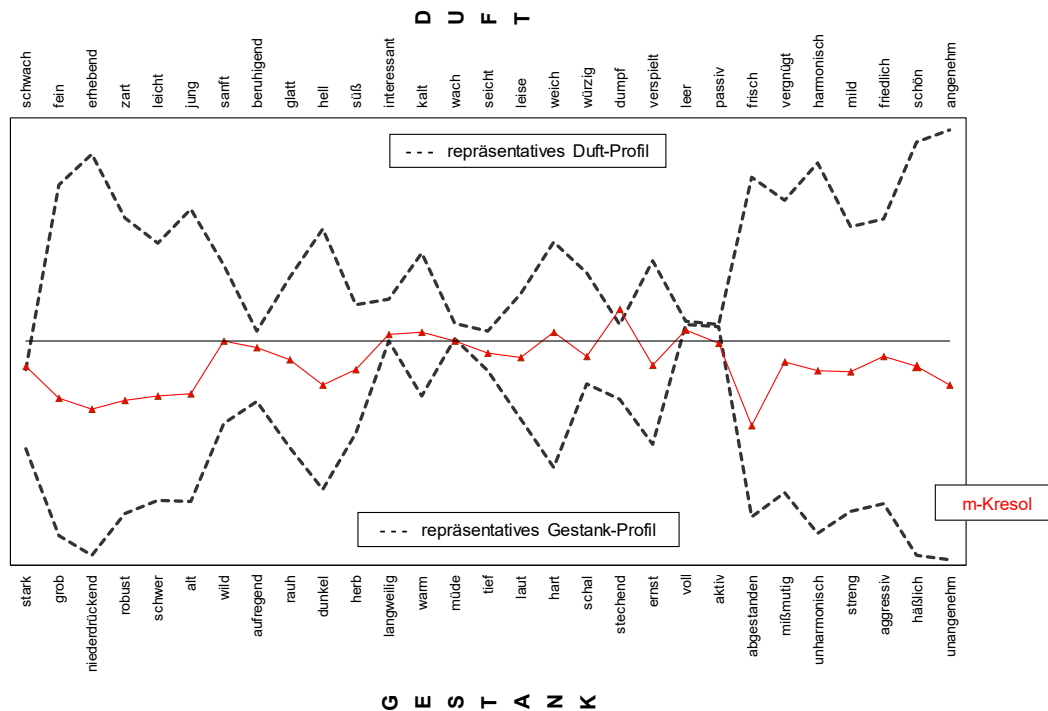
mit:

- I Intensität
- k_W Weber-Fechner-Koeffizient
- c_R Substanzkonzentration in der Riechprobe
- c_{GS} Substanzkonzentration an der Geruchsschwelle

4.11.5 Hedonische Geruchswirkung

Die hedonische Wirkung des m-Kresols ist in Abbildung 24 zusammen mit den repräsentativen Profilen für Duft und Gestank [VDI 3940-4] aufgetragen. Die Bewertung des m-Kresols wurde im Anschluss an die zweite Intensitätsbewertung (Punkt 9 Kapitel 3.2.4.1) vorgenommen, sodass den Prüfern der Geruch gegenwärtig war.

Abbildung 24: m-Kresol – Polaritätenprofil für m-Kresol, Duft und Gestank



repräsentative Profile für Duft und Gestank entsprechend der Daten aus VDI 3940-4

Quelle: Darstellung aus VDI 3940-4; ergänzt um substanzspezifische Daten

Der Produkt-Moment-Korrelationskoeffizient nach Pearson für das Konzept Duft ergibt sich zu -0,63. Für die Korrelation mit dem Konzept Gestank ergibt sich ein Wert von +0,74.

4.11.6 Geruchscharakter

Für die Bewertung des Geruchscharakters wurde m-Kresol mit einer Verdünnung von 1:85 in einen Nalophan®-Beutel überführt und von 5 Prüfern anhand des Charakters bewertet.

Während alle 5 Prüfer die Geruchssprobe als „animalisch“ beschrieben, wurde sie weiterhin je vier Mal als „fäkal“ und „muffig“ beschrieben. Eine weitere Assoziation, die drei Mal genannt wurde, war „Kork“.

4.12 Hexansäure

4.12.1 Probenaufbereitung

Die Probenaufbereitung wurde entsprechend der folgenden Parameter durchgeführt:

Beutelvolumen:	120 L
Vorbefüllung Probenbeutel:	12 L
Verdampfungstemperatur LiGaVa:	150°C
Substanzmenge injiziert:	2 µL
Flowrate nach Injektion:	1 L/min
Reinheit Substanz:	98%
Dichte Substanz:	0,921 g/cm ³
Aggregatzustand:	flüssig

resultierende rechnerische Konzentration im Mutterbeutel: 15,05 mg/m³

Die Berechnung der Substanzkonzentration wurde entsprechend der Formeln (6) und (7) aus Kapitel 3.2.1 vorgenommen.

Für die Vorversuche und die Darbietung der Proben an die Geruchsprüfer wurde jeweils derselbe 120 L Beutel verwendet.

4.12.2 Beschreibung des Prüferkollektivs

Die Überprüfung zur Erfüllung der in der DIN EN13725 festgelegten Anforderungen zur Bewertung von n-Butanol wurde vor der Probenbewertung durchgeführt. Individuelle Ergebnisse der einzelnen Prüfer sind in Tabelle 65 dargestellt.

Tabelle 65: Hexansäure – Prüferüberprüfung nach DIN EN 13725

Anforderungen für die Bewertung von n-Butanol $20 \leq 10^{\bar{y}_{ITE}} \leq 80$ und $10^{s_{ITE}} \leq 2,3$

Team	Prüfer	individuelle Empfindlichkeit $10^{\bar{y}_{ITE}}$ in ppb	individuelle maximale Streuung / Standard-abweichung $10^{s_{ITE}}$ in ppb	Kriterium Empfindlichkeit erfüllt	Kriterium Standard-abweichung erfüllt
A	GÖR	41,510	1,525	✓	✓
A	MEC	44,774	1,421	✓	✓
A	MOF	54,902	1,405	✓	✓
A	SCO	42,688	1,378	✓	✓
B	ELS	54,846	1,742	✓	✓
B	PEL	52,790	1,604	✓	✓

Team	Prüfer	individuelle Empfindlichkeit 10^{YTE} in ppb	individuelle maximale Streuung / Standard-abweichung 10^{SITE} in ppb	Kriterium Empfindlichkeit erfüllt	Kriterium Standard-abweichung erfüllt
B	RAJ	42,891	1,556	✓	✓
B	TÄM	43,141	1,784	✓	✓
C	BRL2	55,075	1,491	✓	✓
C	HAM4	44,347	1,432	✓	✓
C	KOR	40,269	1,806	✓	✓
C	STB	34,991	1,378	✓	✓

Die Ergebnisse der drei Teams sind in Tabelle 66 zusammengestellt.

Tabelle 66: Hexansäure – Geruchsempfindlichkeit der Teams auf n-Butanol nach DIN EN 13725

Datum	Team	Empfindlichkeit in ppb	Präzision $r \leq 0,477$	Genauigkeit $A \leq 0,217$	Mess-leiter	Prüfer 1	Prüfer 2	Prüfer 3	Prüfer 4
20.03.2019	A	47,44	0,2787	0,1487	BES	GÖR	MEC	MOF	SCO
21.03.2019	B	44,72	0,2746	0,1411	BES	ELS	PEL	RAJ	TÄM
22.03.2019	C	39,76	0,2753	0,1318	BES	BRL2	HAM4	KOR	STB

Sowohl alle Prüfer, als auch das gesamte Team, erfüllen damit die Anforderungen nach DIN EN 13725.

4.12.3 Geruchsstoffkonzentration

Für die Bestimmung der Geruchsstoffkonzentration wurden 12 Prüfer eingesetzt, die jeweils 10 gültige Schwellenschätzungen zur Bestimmung der Geruchsstoffkonzentration abgeben mussten. Diese 10 Schwellenschätzungen wurden auf jeweils drei Messungen aufgeteilt (vgl. Kapitel 3.2.4.1), sodass sich mit drei Teams insgesamt neun Messungen ergeben. Jede Messung erfüllte die normativen Anforderungen und wies ein $\Delta Z \leq 5$ auf.

Die ermittelten Geruchsstoffkonzentrationen für Hexansäure sind in der folgenden Tabelle 67 zusammengestellt. Die mittlere Geruchsstoffkonzentration der drei Teams liegt bei $944 \text{ GE}_E/\text{m}^3$.

Tabelle 67: Hexansäure – Geruchsstoffkonzentration nach DIN EN 13725

Einzeldaten für jeden Prüfer und Durchgang, aufgeteilt auf jeweils drei Messungen unter Angabe des geometrischen Gesamtmittelwertes und des oberen und unteren Wertes in Abhängigkeit des 95% Konfidenzintervalls

Prüfer- kürzel / Durch- gang	Geruchsstoffkonzentration in GE _E /m ³											
	MEC	SCO	GÖR	MOF	RAJ	TäM	ELS	PEL	STB	BRL2	HAM 4	KOR
	Team A Messung 1				Team B Messung 1				Team C Messung 1			
1	1425	707	707	1425	1425	707	2897	2897	707	2897	2897	2897
2	707	707	707	707	707	707	2897	2897	356	1425	2897	2897
3	1425	356	707	1425	707	707	2897	1425	356	707	1425	2897
	Team A Messung 2				Team B Messung 2				Team C Messung 2			
4	1425	707	1425	1425	2897	1425	707	707	356	1425	707	1425
5	707	707	707	707	1425	707	1425	1425	356	1425	1425	1425
6	707	707	707	707	1425	1425	707	1425	356	1425	1425	1425
7	707	707	707	707	1425	1425	356	1425	356	707	707	1425
	Team A Messung 3				Team B Messung 3				Team C Messung 3			
8	356	707	1425	1425	1425	707	1425	1425	356	356	707	1425
9	707	707	707	1425	1425	707	707	707	356	356	1425	1425
10	707	707	707	707	707	356	707	707	356	707	707	707
Gesamtmittelwert (geometrisch)												944
95% Konfidenzintervall unterer Wert												725
95% Konfidenzintervall oberer Wert												1229

Die Bewertungen der Geruchsstoffkonzentration sind sowohl innerhalb der Teams als auch teamübergreifend homogen.

4.12.4 Intensitäten und Weber-Fechner-Koeffizient

Aus den Einzelbewertungen der eingesetzten Prüfer (siehe Anhang A.1.11) ergibt sich durch die Datenaufbereitung entsprechend Kapitel 3.1.2 die Häufigkeit der Intensitätsüberschreitung bezüglich der zugehörigen logarithmierten Verdünnungszahlen wie in Tabelle 68 dargestellt.

Tabelle 68: Hexansäure – Zuordnung der Häufigkeiten der Intensitätsüberschreitungen zu den vorgegebenen Logarithmen der Verdünnungszahlen

log Z / Häufigkeit	3,6	3,3	3,0	2,7	2,4	2,1	1,8	1,5	1,3	1,0
$H(I > 0)$	0,25	0,25	0,78	0,97	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00
$H(I > 1)$	0,00	0,00	0,25	0,75	0,97	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00
$H(I > 2)$	0,00	0,00	0,00	0,14	0,78	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00
$H(I > 3)$	0,00	0,00	0,00	0,00	0,06	0,50	0,83	1,00	0,97	1,00
$H(I > 4)$	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,06	0,31	0,72	0,83	0,94
$H(I > 5)$	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,25	0,28	0,41

Durch Auftragung der Intensitätshäufigkeiten über die logarithmierten Verdünnungszahlen ergeben sich für $H(I > 0)$ bis $H(I > 4)$ fünf einzelne Diagramme, aus denen sich die 16-, 50- und 84-Perzentile $\hat{Z}_{16}$, $\hat{Z}_{50}$ und $\hat{Z}_{84}$ graphisch ableiten lassen (siehe Tabelle 69).

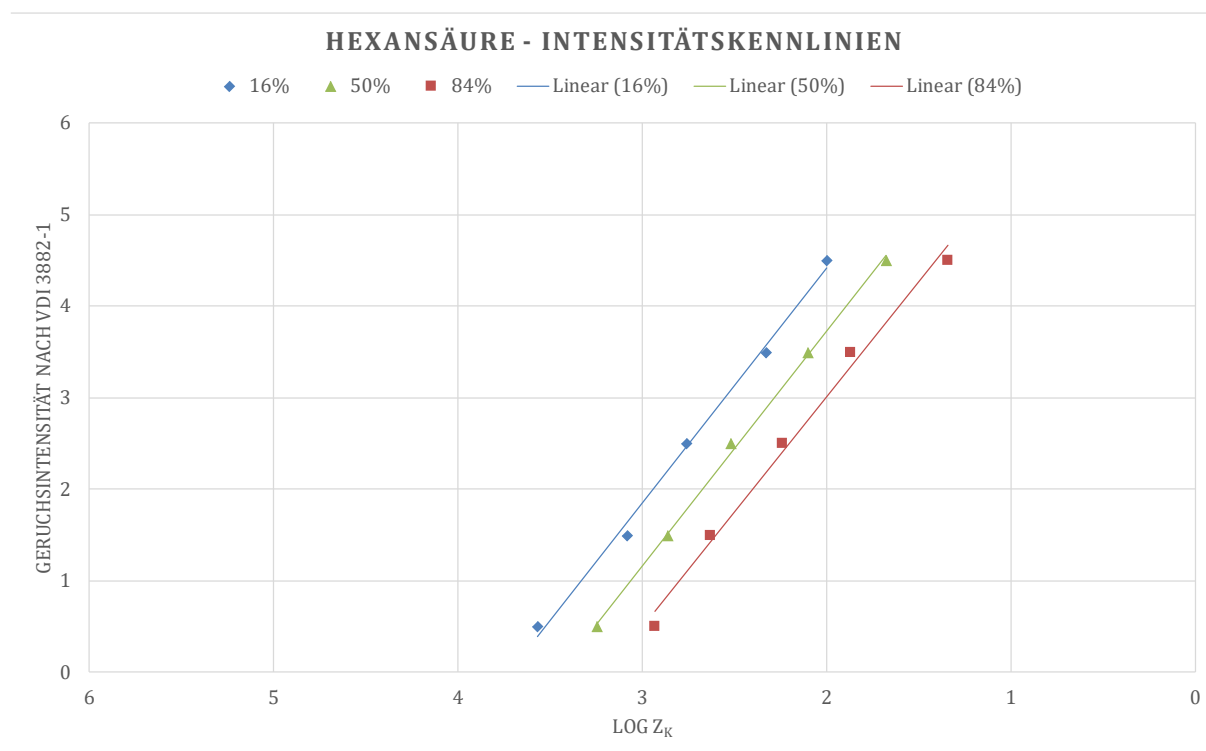
Tabelle 69: Hexansäure – Kenngrößen der Intensitätsstufen I_s

Graphisch ermittelt aus der Auftragung der Häufigkeiten der Intensitätsüberschreitung über die logarithmierten Verdünnungsstufen

I_s	$I = I_s + 0,5$	log Z_{16}	log Z_{50}	log Z_{84}
0	0,5	3,57	3,25	2,93
1	1,5	3,08	2,86	2,63
2	2,5	2,76	2,52	2,24
3	3,5	2,33	2,10	1,87
4	4,5	2,00	1,68	1,34

Durch Auftragung der Daten aus Tabelle 69 ergibt sich die folgende Abbildung 25.

Abbildung 25: Hexansäure – Intensitätskennlinien für $\hat{Z}_{16}$, $\hat{Z}_{50}$ und $\hat{Z}_{84}$ nach VDI 3882-1



Quelle: eigene Darstellung Olfasense GmbH

Die Parameter, die sich für diese Kennlinien ergeben sind in der folgenden Tabelle 70 zusammengestellt.

Tabelle 70: Hexansäure – Parameter der Geradengleichungen der 16-, 50- und 84-Perzentile

Angabe der Korrelationskoeffizienten R, der Bestimmtheitsmaße R^2 sowie der Steigung b und des Achsenabschnittes a

Parameter	Formelzeichen	◆ 16%	▲ 50%	■ 84%
Korrelationskoeffizient	R	-0,998	-0,999	-0,995
Bestimmtheitsmaß	R^2	0,995	0,999	0,990
Steigung	b	-2,56	-2,56	-2,51
Achsenabschnitt	a	9,53	8,85	8,03

Aus dieser Darstellung lässt sich der Weber-Fechner-Koeffizient mit $k_w = 2,56$ ableiten, sodass sich gemäß Formel (5) in Kapitel 3.1.2 der folgende Zusammenhang für Hexansäure ergibt:

$$I = 2,56 \cdot \log\left(\frac{c_R}{c_{GS}}\right) \quad (20)$$

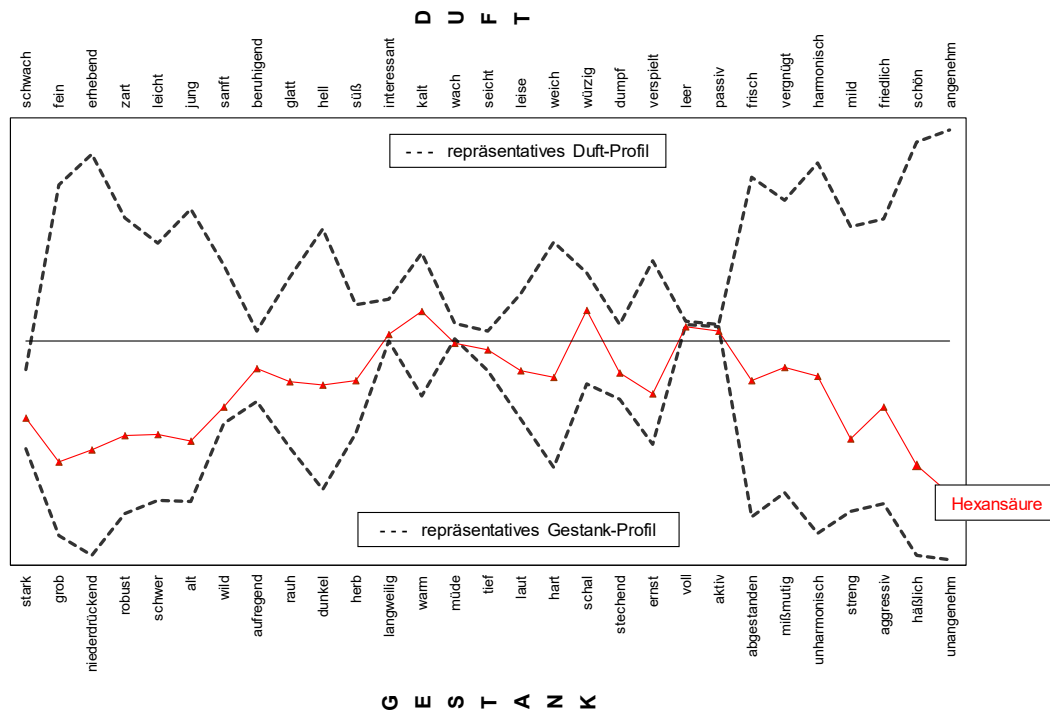
mit:

- I Intensität
- k_W Weber-Fechner-Koeffizient
- c_R Substanzkonzentration in der Riechprobe
- c_{GS} Substanzkonzentration an der Geruchsschwelle

4.12.5 Hedonische Geruchswirkung

Die hedonische Wirkung der Hexansäure ist in Abbildung 26 zusammen mit den repräsentativen Profilen für Duft und Gestank [VDI 3940-4] aufgetragen. Die Bewertung der Hexansäure wurde im Anschluss an die zweite Intensitätsbewertung (Punkt 9 Kapitel 3.2.4.1) vorgenommen, sodass den Prüfern der Geruch gegenwärtig war.

Abbildung 26: Hexansäure – Polaritätenprofil für Hexansäure, Duft und Gestank



repräsentative Profile für Duft und Gestank entsprechend der Daten aus VDI 3940-4

Quelle: Darstellung aus VDI 3940-4; ergänzt um substanzspezifische Daten

Der Produkt-Moment-Korrelationskoeffizient nach Pearson für das Konzept Duft ergibt sich zu -0,63. Für die Korrelation mit dem Konzept Gestank ergibt sich ein Wert von +0,83.

4.12.6 Geruchsscharakter

Für die Bewertung des Geruchsscharakters wurde Hexansäure mit einer Verdünnung von 1:44 in einen Nalophan®-Beutel überführt und von 5 Prüfern anhand des Charakters bewertet.

Alle 5 Prüfer beschrieben die Geruchsprobe als „sauer“. Vier Prüfer empfanden die Probe weiterhin als „muffig“ und „stechend“. Weitere Beschreibungen waren „synthetisch“, „beißend“ und „käsigt“.

4.13 p-Kresol

4.13.1 Probenaufbereitung

Die Probenaufbereitung wurde entsprechend der folgenden Parameter durchgeführt:

Beutelvolumen:	60 L
Vorbefüllung Probenbeutel:	6 L
Verdampfungstemperatur LiGaVa:	150°C
Substanzmenge injiziert:	5 µL
Flowrate nach Injektion:	1 L/min
Reinheit Substanz:	100%
Dichte Substanz:	1,03 g/cm ³
Aggregatzustand:	fest
Lösungsmittel:	Isopropanol
Gelöste Substanzmenge:	118 mg
Volumen Lösungsmittel:	10 ml

resultierende rechnerische Konzentration im Mutterbeutel: $0,98 \text{ mg/m}^3$

Die Berechnung der Substanzkonzentration wurde entsprechend der Formeln (6) und (7) aus Kapitel 3.2.1 vorgenommen.

Für die Vorversuche und die Darbietung der Proben an die Geruchsprüfer wurde jeweils derselbe 60 L Beutel verwendet.

4.13.2 Beschreibung des Prüferkollektivs

Die Überprüfung zur Erfüllung der in der DIN EN13725 festgelegten Anforderungen zur Bewertung von n-Butanol wurde vor der Probenbewertung durchgeführt. Individuelle Ergebnisse der einzelnen Prüfer sind in Tabelle 71 dargestellt.

Tabelle 71: p-Kresol – Prüferüberprüfung nach DIN EN 13725

Anforderungen für die Bewertung von n-Butanol $20 \leq 10^{\bar{y}_{ITE}} \leq 80$ und $10^{s_{ITE}} \leq 2,3$

Team	Prüfer	individuelle Empfindlichkeit $10^{\bar{y}_{ITE}}$ in ppb	individuelle maximale Streuung / Standard-abweichung $10^{s_{ITE}}$ in ppb	Kriterium Empfindlichkeit erfüllt	Kriterium Standard-abweichung erfüllt
A	MOF	47,516	1,402	✓	✓
A	SCO	60,434	1,437	✓	✓
A	STB	35,998	1,348	✓	✓

Team	Prüfer	individuelle Empfindlichkeit 10^{YTE} in ppb	individuelle maximale Streuung / Standardabweichung 10^{SITE} in ppb	Kriterium Empfindlichkeit erfüllt	Kriterium Standardabweichung erfüllt
A	SÜM	47,174	1,611	✓	✓
B	HAE	45,362	1,399	✓	✓
B	HAM4	46,032	1,565	✓	✓
B	KEH	49,540	1,627	✓	✓
B	SEH	44,671	1,509	✓	✓
C	ELS	55,827	2,009	✓	✓
C	KOI	67,866	1,415	✓	✓
C	MEC	42,910	1,484	✓	✓
C	RAJ	41,067	1,619	✓	✓

Die Ergebnisse der drei Teams sind in Tabelle 72 zusammengestellt.

Tabelle 72: p-Kresol – Geruchsempfindlichkeit der Teams auf n-Butanol nach DIN EN 13725

Datum	Team	Empfindlichkeit in ppb	Präzision $r \leq 0,477$	Genauigkeit $A \leq 0,217$	Messleiter	Prüfer 1	Prüfer 2	Prüfer 3	Prüfer 4
03.04.2019	A	44,77	0,2083	0,1235	BEA	MOF	SCO	STB	SÜM
17.04.2019	B	39,81	0,2416	0,0917	BRL2	HAE	HAM4	KEH	SEH
05.04.2019	C	33,32	0,2262	0,1232	BEA	ELS	KOI	MEC	RAJ

Sowohl alle Prüfer, als auch das gesamte Team, erfüllen damit die Anforderungen nach DIN EN 13725.

4.13.3 Geruchsstoffkonzentration

Für die Bestimmung der Geruchsstoffkonzentration wurden 12 Prüfer eingesetzt, die jeweils 10 gültige Schwellenschätzungen zur Bestimmung der Geruchsstoffkonzentration abgeben mussten. Diese 10 Schwellenschätzungen wurden auf jeweils drei Messungen aufgeteilt (vgl. Kapitel 3.2.4.1), sodass sich mit drei Teams insgesamt neun Messungen ergeben. Jede Messung erfüllte die normativen Anforderungen und wies ein $\Delta Z \leq 5$ auf.

Die ermittelten Geruchsstoffkonzentrationen für p-Kresol sind in der folgenden Tabelle 73 zusammengestellt. Die mittlere Geruchsstoffkonzentration der drei Teams liegt bei $2710 \text{ GE}_E/\text{m}^3$.

Tabelle 73: p-Kresol – Geruchsstoffkonzentration nach DIN EN 13725

Einzeldaten für jeden Prüfer und Durchgang, aufgeteilt auf jeweils drei Messungen unter Angabe des geometrischen Gesamtmittelwertes und des oberen und unteren Wertes in Abhängigkeit des 95% Konfidenzintervalls

Prüfer- kürzel / Durch- gang	Geruchsstoffkonzentration in GE _E /m ³											
	STB	MOF	SCO	SüM	KEH	SEH	HAM 4	HAE	RAJ	KOI	MEC	ELS
	Team A Messung 1				Team B Messung 1				Team C Messung 1			
1	5789	2897	1425	5789	2897	5789	5789	24108	24108	5789	11593	11593
2	2897	2897	2897	5789	11593	5789	11593	5789	11593	2897	24108	24108
3	2897	707	707	5789	2897	2897	2897	5789	11593	5789	11593	24108
	Team A Messung 2				Team B Messung 2				Team C Messung 2			
4	1425	707	356	1425	2897	2897	5789	2897	5789	5789	2897	2897
5	1425	356	356	1425	5789	2897	5789	2897	5789	5789	5789	11593
6	1425	186	186	1425	2897	1425	2897	2897	5789	5789	2897	5789
7	1425	1425	186	1425	5789	1425	2897	2897	5789	2897	2897	2897
	Team A Messung 3				Team B Messung 3				Team C Messung 3			
8	1425	707	356	707	5789	1425	2897	2897	1425	2897	1425	5789
9	707	707	707	1425	5789	707	2897	2897	5789	2897	2897	5789
10	1425	186	707	1425	2897	707	2897	2897	2897	2897	1425	1425
Gesamtmittelwert (geometrisch)												2710
95% Konfidenzintervall unterer Wert												2081
95% Konfidenzintervall oberer Wert												3529

Die Geruchsstoffkonzentrationen weisen von der ersten zur dritten Messung eine deutliche Abnahme von durchschnittlich 5703 GE_E/m³ auf 1707/m³ auf, was etwa 2 Verdünnungsstufen entspricht. Diese Abnahme findet sich allerdings nicht in der GC-MS-Analyse der Konzentrationen von p-Kresol wieder (vgl. Tabelle 127 in Kapitel 5.1), sodass von deutlichen Adaptationseffekten für p-Kresol ausgegangen werden kann. Neben der Abnahme der Geruchsstoffkonzentration innerhalb der Teams um bis zu zwei Verdünnungsstufen wird auch deutlich, dass die ermittelten Geruchsstoffkonzentrationen zwischen den Teams teils deutlich abweichen. Mit Ausnahme der ersten Messung sind die Daten der Teams B und C miteinander vergleichbar, während Team A deutlich geringere Bewertungen aufweist. Es ist daher anzunehmen, dass die Prüfer des Team A vergleichsweise unsensibel für den Geruchsstoff p-Kresol sind.

4.13.4 Intensitäten und Weber-Fechner-Koeffizient

Aus den Einzelbewertungen der eingesetzten Prüfer (siehe Anhang A.1.12) ergibt sich durch die Datenaufbereitung entsprechend Kapitel 3.1.2 die Häufigkeit der Intensitätsüberschreitung bezüglich der zugehörigen logarithmierten Verdünnungszahlen wie in Tabelle 74 dargestellt.

Tabelle 74: p-Kresol – Zuordnung der Häufigkeiten der Intensitätsüberschreitungen zu den vorgegebenen Logarithmen der Verdünnungszahlen

log Z / Häufigkeit	3,9	3,6	3,3	3,0	2,7	2,4	2,1	1,8	0,7
$H(I > 0)$	0,36	0,36	0,75	0,92	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00
$H(I > 1)$	0,08	0,11	0,42	0,67	0,78	0,97	1,00	1,00	1,00
$H(I > 2)$	0,03	0,00	0,03	0,44	0,47	0,72	0,94	1,00	1,00
$H(I > 3)$	0,00	0,00	0,00	0,08	0,17	0,44	0,58	0,83	1,00
$H(I > 4)$	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,11	0,14	0,47	0,94
$H(I > 5)$	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,11	0,56

Durch Auftragung der Intensitätshäufigkeiten über die logarithmierten Verdünnungszahlen ergeben sich für $H(I > 0)$ bis $H(I > 4)$ fünf einzelne Diagramme, aus denen sich die 16-, 50- und 84-Perzentile $\hat{Z}_{16}$, $\hat{Z}_{50}$ und $\hat{Z}_{84}$ graphisch ableiten lassen (siehe Tabelle 75).

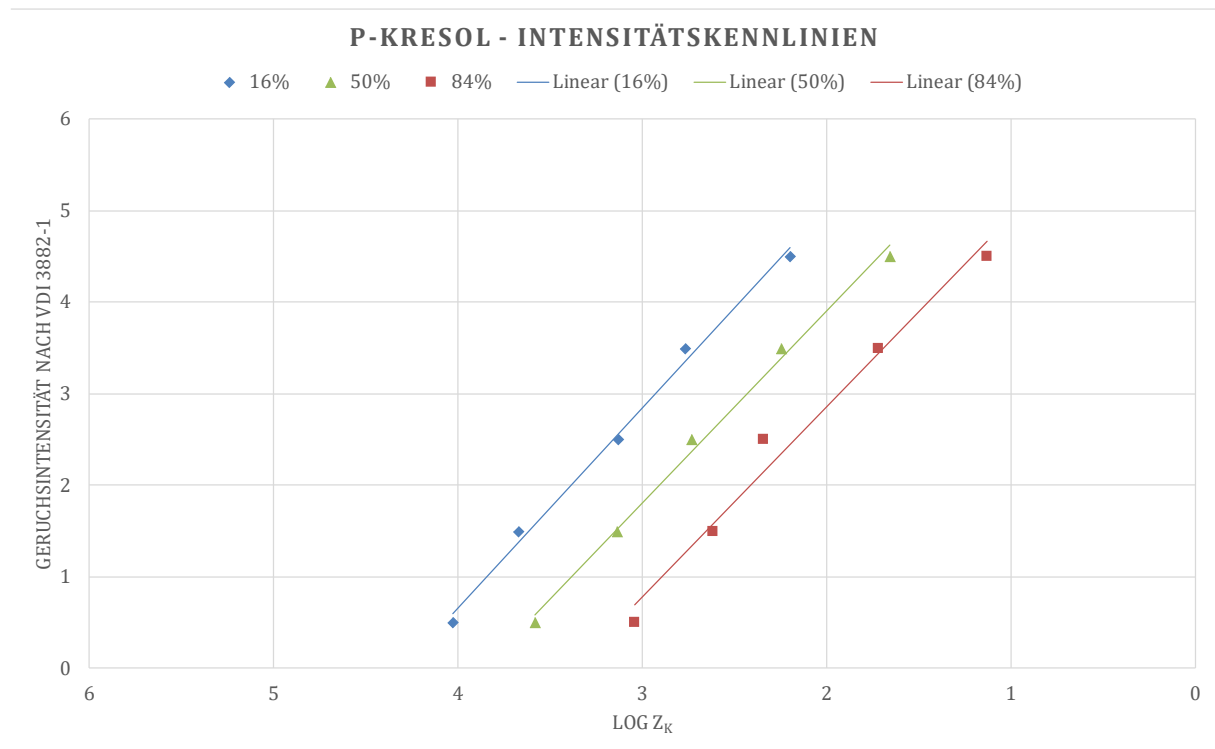
Tabelle 75: p-Kresol – Kenngrößen der Intensitätsstufen I_s

Graphisch ermittelt aus der Auftragung der Häufigkeiten der Intensitätsüberschreitung über die logarithmierten Verdünnungsstufen

I_s	$I = I_s + 0,5$	log Z_{16}	log Z_{50}	log Z_{84}
0	0,5	4,03	3,58	3,04
1	1,5	3,67	3,14	2,62
2	2,5	3,13	2,73	2,34
3	3,5	2,77	2,25	1,72
4	4,5	2,20	1,66	1,13

Durch Auftragung der Daten aus Tabelle 75 ergibt sich die folgende Abbildung 27.

Abbildung 27: p-Kresol – Intensitätskennlinien für $\hat{Z}_{16}$, $\hat{Z}_{50}$ und $\hat{Z}_{84}$ nach VDI 3882-1



Quelle: eigene Darstellung Olfasense GmbH

Die Parameter, die sich für diese Kennlinien ergeben sind in der folgenden Tabelle 76 zusammengestellt.

Tabelle 76: p-Kresol – Parameter der Geradengleichungen der 16-, 50- und 84-Perzentile

Angabe der Korrelationskoeffizienten R, der Bestimmtheitsmaße R² sowie der Steigung b und des Achsenabschnittes a

Parameter	Formelzeichen	◆ 16%	▲ 50%	■ 84%
Korrelationskoeffizient	R	-0,997	-0,997	-0,990
Bestimmtheitsmaß	R ²	0,994	0,995	0,980
Steigung	b	-2,18	-2,10	-2,08
Achsenabschnitt	a	9,39	8,12	7,01

Aus dieser Darstellung lässt sich der Weber-Fechner-Koeffizient mit $k_w = 2,10$ ableiten, sodass sich gemäß Formel (5) in Kapitel 3.1.2 der folgende Zusammenhang für p-Kresol ergibt:

$$I = 2,10 \cdot \log\left(\frac{c_R}{c_{GS}}\right) \quad (21)$$

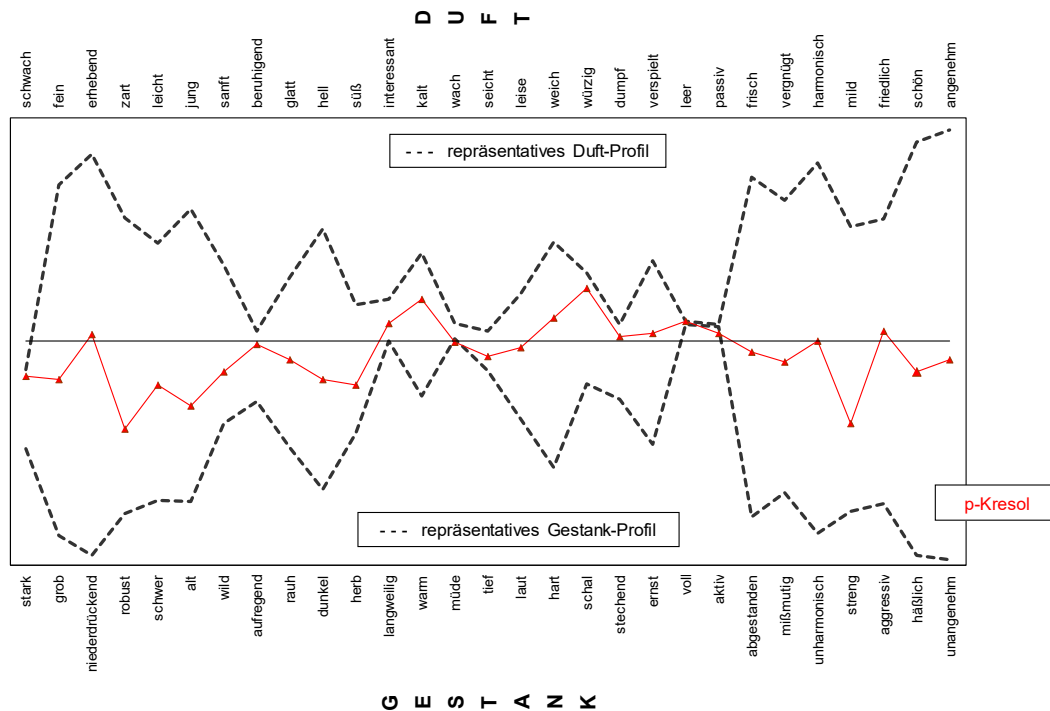
mit:

- I Intensität
- k_W Weber-Fechner-Koeffizient
- c_R Substanzkonzentration in der Riechprobe
- c_{GS} Substanzkonzentration an der Geruchsschwelle

4.13.5 Hedonische Geruchswirkung

Die hedonische Wirkung des p-Kresols ist in Abbildung 28 zusammen mit den repräsentativen Profilen für Duft und Gestank [VDI 3940-4] aufgetragen. Die Bewertung des p-Kresols wurde im Anschluss an die zweite Intensitätsbewertung (Punkt 9 Kapitel 3.2.4.1) vorgenommen, sodass den Prüfern der Geruch gegenwärtig war.

Abbildung 28: p-Kresol – Polaritätenprofil für p-Kresol, Duft und Gestank



repräsentative Profile für Duft und Gestank entsprechend der Daten aus VDI 3940-4

Quelle: Darstellung aus VDI 3940-4; ergänzt um substanzspezifische Daten

Der Produkt-Moment-Korrelationskoeffizient nach Pearson für das Konzept Duft ergibt sich zu -0,22. Für die Korrelation mit dem Konzept Gestank ergibt sich ein Wert von +0,49.

4.13.6 Geruchscharakter

Für die Bewertung des Geruchscharakters wurde p-Kresol mit einer Verdünnung von 1:43 in einen Nalophan®-Beutel überführt und von 5 Prüfern anhand des Charakters bewertet.

Während alle 5 Prüfer die Geruchsprobe als „fäkal“ beschrieben, wurde sie weiterhin je vier Mal als „animalisch“ und „stallig“ beschrieben. Weitere Assoziationen waren „stechend“, „faulig“, „muffig“ und „organisch“.

4.14 2,4,6-Trichloranisol

4.14.1 Probenaufbereitung

Die Probenaufbereitung wurde entsprechend der folgenden Parameter durchgeführt:

Beutelvolumen:	70 L
Vorbefüllung Probenbeutel:	7 L
Verdampfungstemperatur LiGaVa:	150°C
Substanzmenge injiziert:	2 µL
Flowrate nach Injektion:	1 L/min
Reinheit Substanz:	99%
Aggregatzustand:	fest
Lösungsmittel:	Isopropanol
Gelöste Substanzmenge:	400 mg
Volumen Lösungsmittel:	5 ml

resultierende rechnerische Konzentration im Mutterbeutel: $2,26 \text{ mg/m}^3$

Die Berechnung der Substanzkonzentration wurde entsprechend der Formeln (6) und (7) aus Kapitel 3.2.1 vorgenommen.

Für die Vorversuche und die Darbietung der Proben an die Geruchsprüfer wurde jeweils derselbe 70 L Beutel verwendet.

4.14.2 Beschreibung des Prüferkollektivs

Die Überprüfung zur Erfüllung der in der DIN EN13725 festgelegten Anforderungen zur Bewertung von n-Butanol wurde vor der Probenbewertung durchgeführt. Individuelle Ergebnisse der einzelnen Prüfer sind in Tabelle 77 dargestellt.

Tabelle 77: 2,4,6-Trichloranisol – Prüferüberprüfung nach DIN EN 13725

Anforderungen für die Bewertung von n-Butanol $20 \leq 10^{\bar{y}_{ITE}} \leq 80$ und $10^{s_{ITE}} \leq 2,3$

Team	Prüfer	individuelle Empfindlichkeit $10^{\bar{y}_{ITE}}$ in ppb	individuelle maximale Streuung / Standard-abweichung $10^{s_{ITE}}$ in ppb	Kriterium Empfindlichkeit erfüllt	Kriterium Standard-abweichung erfüllt
A	GIJ	36,350	1,537	✓	✓
A	MOF	45,761	1,355	✓	✓
A	RAJ	36,891	1,797	✓	✓
A	TÄM	42,577	1,813	✓	✓

Team	Prüfer	individuelle Empfindlichkeit 10^{YTE} in ppb	individuelle maximale Streuung / Standard-abweichung 10^{SITE} in ppb	Kriterium Empfindlichkeit erfüllt	Kriterium Standard-abweichung erfüllt
B	BES	40,149	1,369	✓	✓
B	BRL2	56,671	1,418	✓	✓
B	ERF	50,627	1,542	✓	✓
B	HAM4	42,699	1,576	✓	✓
C	HAE	44,189	1,510	✓	✓
C	KOR	41,255	1,786	✓	✓
C	MEC	44,190	1,528	✓	✓
C	STB	39,730	1,233	✓	✓

Die Ergebnisse der drei Teams sind in Tabelle 78 zusammengestellt.

Tabelle 78: 2,4,6-Trichloranisol – Geruchsempfindlichkeit der Teams auf n-Butanol nach DIN EN 13725

Datum	Team	Empfindlichkeit in ppb	Präzision $r \leq 0,477$	Genauigkeit $A \leq 0,217$	Mess-leiter	Prüfer 1	Prüfer 2	Prüfer 3	Prüfer 4
09.04.2019	A	26,34	0,2844	0,1228	BRL2	GIJ	MOF	RAJ	TÄM
26.04.2019	B	35,37	0,2259	0,0761	BEA	BES	BRL2	ERF	HAM4
11.04.2019	C	44,75	0,2543	0,1074	BES	HAE	KOR	MEC	STB

Sowohl alle Prüfer, als auch das gesamte Team, erfüllen damit die Anforderungen nach DIN EN 13725.

4.14.3 Geruchsstoffkonzentration

Für die Bestimmung der Geruchsstoffkonzentration wurden 12 Prüfer eingesetzt, die jeweils 10 gültige Schwellenschätzungen zur Bestimmung der Geruchsstoffkonzentration abgeben mussten. Diese 10 Schwellenschätzungen wurden auf jeweils drei Messungen aufgeteilt (vgl. Kapitel 3.2.4.1), sodass sich mit drei Teams insgesamt neun Messungen ergeben. Jede Messung erfüllte die normativen Anforderungen und wies ein $\Delta Z \leq 5$ auf.

Die ermittelten Geruchsstoffkonzentrationen für 2,4,6-Trichloranisol sind in der folgenden Tabelle 79 zusammengestellt. Die mittlere Geruchsstoffkonzentration der drei Teams liegt bei $28207 \text{ GE}_E/\text{m}^3$.

Tabelle 79: 2,4,6-Trichloranisol – Geruchsstoffkonzentration nach DIN EN 13725

Einzeldaten für jeden Prüfer und Durchgang, aufgeteilt auf jeweils drei Messungen unter Angabe des geometrischen Gesamtmittelwertes und des oberen und unteren Wertes in Abhängigkeit des 95% Konfidenzintervalls

Prüfer- kürzel / Durch- gang	Geruchsstoffkonzentration in GE _E /m ³											
	RAJ	TäM	MOF	GIJ	BRL2	ERF	HAM 4	BES	STB	KOR	MEC	HAE
	Team A Messung 1				Team B Messung 1				Team C Messung 1			
1	11593	49198	49198	49198	24108	11593	24108	49198	49198	49198	24108	49198
2	24108	24108	24108	24108	49198	11593	24108	49198	49198	49198	24108	49198
3	49198	49198	49198	49198	49198	11593	24108	24108	49198	49198	24108	49198
	Team A Messung 2				Team B Messung 2				Team C Messung 2			
4	24108	49198	24108	49198	24108	11593	11593	49198	24108	49198	24108	49198
5	49198	49198	49198	11593	49198	11593	49198	24108	49198	49198	24108	49198
6	24108	49198	24108	11593	49198	11593	24108	24108	49198	49198	11593	49198
7	49198	24108	11593	11593	49198	11593	24108	49198	49198	49198	24108	24108
	Team A Messung 3				Team B Messung 3				Team C Messung 3			
8	24108	24108	5789	11593	24108	11593	24108	49198	24108	24108	24108	11593
9	24108	11593	24108	11593	24108	11593	49198	24108	49198	49198	11593	49198
10	24108	24108	24108	5789	24108	11593	49198	24108	49198	49198	49198	49198
Gesamtmittelwert (geometrisch)												28207
95% Konfidenzintervall unterer Wert												21658
95% Konfidenzintervall oberer Wert												36736

Die Bewertungen der Geruchsstoffkonzentration sind sowohl innerhalb der Teams als auch teamübergreifend homogen.

4.14.4 Intensitäten und Weber-Fechner-Koeffizient

Aus den Einzelbewertungen der eingesetzten Prüfer (siehe Anhang A.1.13) ergibt sich durch die Datenaufbereitung entsprechend Kapitel 3.1.2 die Häufigkeit der Intensitätsüberschreitung bezüglich der zugehörigen logarithmierten Verdünnungszahlen wie in Tabelle 80 dargestellt.

Tabelle 80: 2,4,6-Trichloranisol – Zuordnung der Häufigkeiten der Intensitätsüberschreitungen zu den vorgegebenen Logarithmen der Verdünnungszahlen

log Z / Häufigkeit	4,8	4,5	4,2	3,9	3,6	3,3	3,0	1,8
$H(I>0)$	0,50	0,58	1,00	0,94	1,00	1,00	1,00	1,00
$H(I>1)$	0,00	0,17	0,86	0,83	0,75	1,00	0,97	1,00
$H(I>2)$	0,00	0,06	0,36	0,47	0,50	0,94	0,97	0,97
$H(I>3)$	0,00	0,00	0,08	0,22	0,14	0,83	0,89	0,94
$H(I>4)$	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,33	0,39	0,67
$H(I>5)$	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,03	0,03	0,25

Durch Auftragung der Intensitätshäufigkeiten über die logarithmierten Verdünnungszahlen ergeben sich für $H(I>0)$ bis $H(I>4)$ fünf einzelne Diagramme, aus denen sich die 16-, 50- und 84-Perzentile $\hat{Z}_{16}$, $\hat{Z}_{50}$ und $\hat{Z}_{84}$ graphisch ableiten lassen (siehe Tabelle 81).

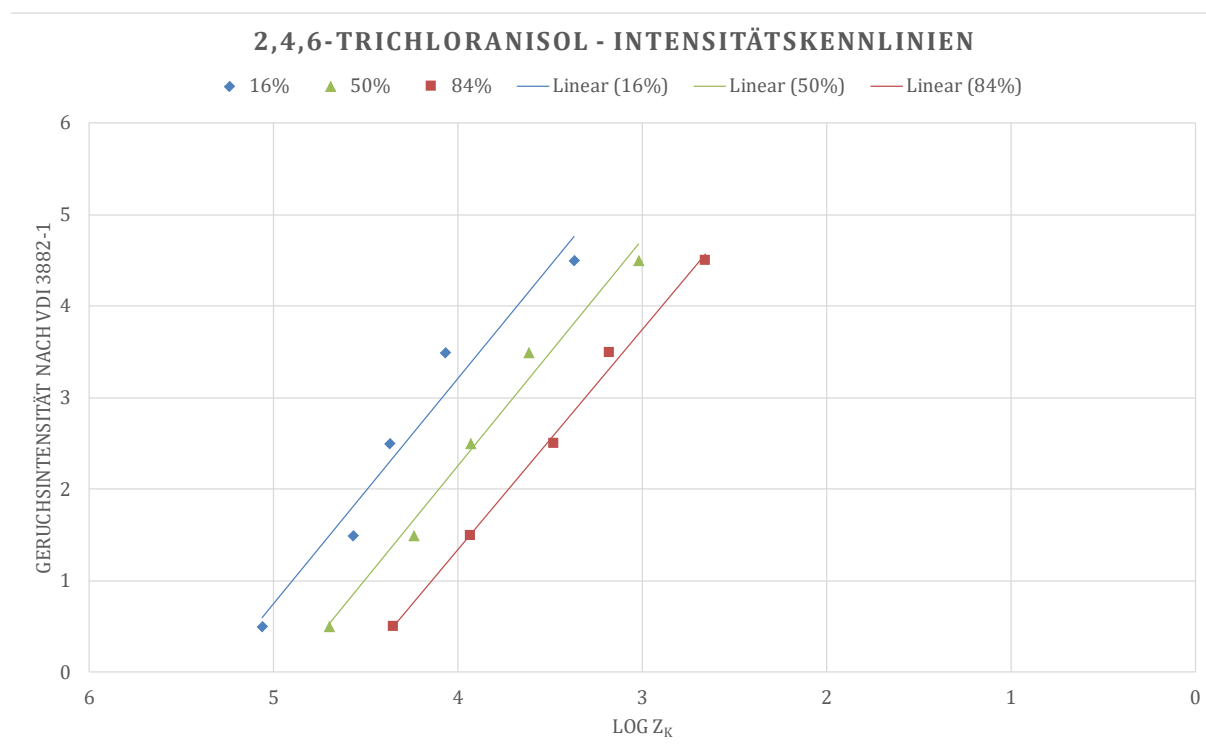
Tabelle 81: 2,4,6-Trichloranisol – Kenngrößen der Intensitätsstufen I_s

Graphisch ermittelt aus der Auftragung der Häufigkeiten der Intensitätsüberschreitung über die logarithmierten Verdünnungsstufen

I_s	$I = I_s + 0,5$	log Z_{16}	log Z_{50}	log Z_{84}
0	0,5	5,06	4,70	4,35
1	1,5	4,57	4,24	3,93
2	2,5	4,37	3,93	3,48
3	3,5	4,07	3,62	3,18
4	4,5	3,37	3,02	2,66

Durch Auftragung der Daten aus Tabelle 81 ergibt sich die folgende Abbildung 29.

Abbildung 29: 2,4,6-Trichloranisol – Intensitätskennlinien für Ž16, Ž50 und Ž84 nach VDI 3882-1



Quelle: eigene Darstellung Olfasense GmbH

Die Parameter, die sich für diese Kennlinien ergeben sind in der folgenden Tabelle 82 zusammengestellt.

Tabelle 82: 2,4,6-Trichloranisol – Parameter der Geradengleichungen der 16-, 50- und 84-Perzentile

Angabe der Korrelationskoeffizienten R, der Bestimmtheitsmaße R² sowie der Steigung b und des Achsenabschnittes a

Parameter	Formelzeichen	◆ 16%	▲ 50%	■ 84%
Korrelationskoeffizient	R	-0,978	-0,992	-0,998
Bestimmtheitsmaß	R ²	0,957	0,984	0,995
Steigung	b	-2,47	-2,47	-2,41
Achsenabschnitt	a	13,08	12,15	10,98

Aus dieser Darstellung lässt sich der Weber-Fechner-Koeffizient mit $k_w = 2,47$ ableiten, sodass sich gemäß Formel (5) in Kapitel 3.1.2 der folgende Zusammenhang für 2,4,6-Trichloranisol ergibt:

$$I = 2,47 \cdot \log\left(\frac{c_R}{c_{GS}}\right) \quad (22)$$

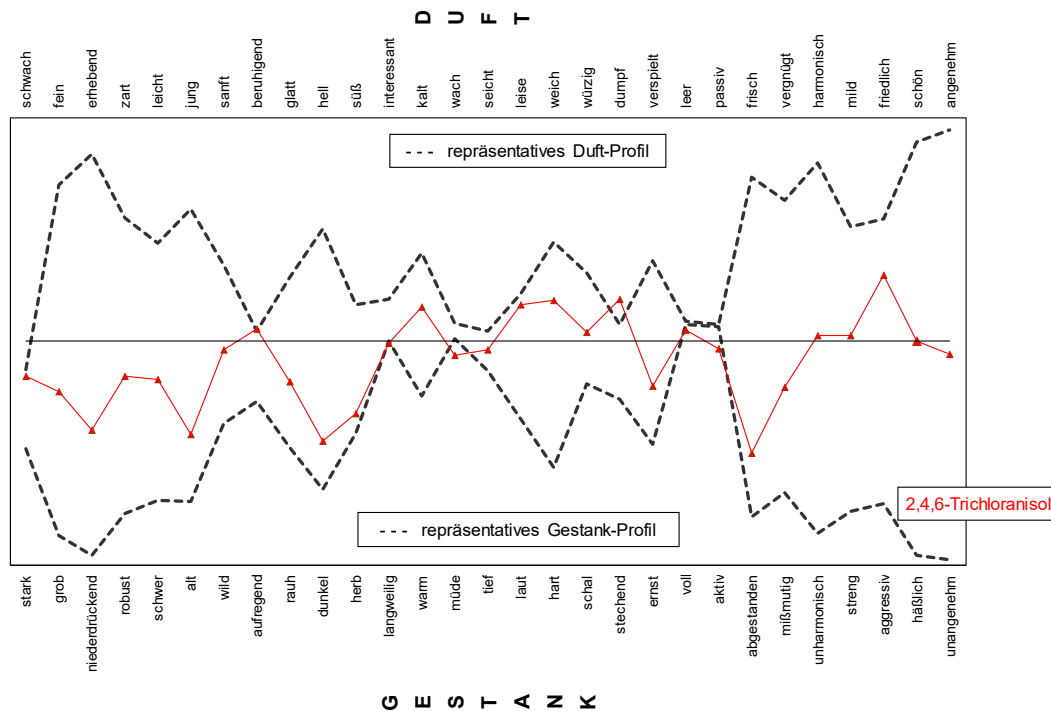
mit:

- I Intensität
- k_W Weber-Fechner-Koeffizient
- c_R Substanzkonzentration in der Riechprobe
- c_{GS} Substanzkonzentration an der Geruchsschwelle

4.14.5 Hedonische Geruchswirkung

Die hedonische Wirkung des 2,4,6-Trichloranisols ist in Abbildung 30 zusammen mit den repräsentativen Profilen für Duft und Gestank [VDI 3940-4] aufgetragen. Die Bewertung des 2,4,6-Trichloranisols wurde im Anschluss an die zweite Intensitätsbewertung (Punkt 9 Kapitel 3.2.4.1) vorgenommen, sodass den Prüfern der Geruch gegenwärtig war.

Abbildung 30: 2,4,6-Trichloranisol – Polaritätenprofil für 2,4,6-Trichloranisol, Duft und Gestank



repräsentative Profile für Duft und Gestank entsprechend der Daten aus VDI 3940-4

Quelle: Darstellung aus VDI 3940-4; ergänzt um substanzspezifische Daten

Der Produkt-Moment-Korrelationskoeffizient nach Pearson für das Konzept Duft ergibt sich zu -0,29. Für die Korrelation mit dem Konzept Gestank ergibt sich ein Wert von +0,36.

4.14.6 Geruchscharakter

Für die Bewertung des Geruchscharakters wurde 2,4,6-Trichloranisol mit einer Verdünnung von 1:999 in einen Nalophan®-Beutel überführt und von 5 Prüfern anhand des Charakters bewertet.

Während alle 5 Prüfer die Geruchsprobe als „muffig“ beschrieben, wurde sie weiterhin vier Mal als „korkig“ beschrieben. Weitere Assoziationen waren „staubig“, „sauer“ und „Plastik“.

4.15 Naphthalin

4.15.1 Probenaufbereitung

Die Probenaufbereitung wurde entsprechend der folgenden Parameter durchgeführt:

Beutelvolumen:	70 L
Vorbefüllung Probenbeutel:	7 L
Verdampfungstemperatur LiGaVa:	230°C
Substanzmenge injiziert:	14 µL
Flowrate nach Injektion:	1 L/min
Reinheit Substanz:	99%
Dichte Substanz:	1,14 g/cm ³
Aggregatzustand:	fest
Lösungsmittel:	Isopropanol
Gelöste Substanzmenge:	122 mg
Volumen Lösungsmittel:	10 ml

resultierende rechnerische Konzentration im Mutterbeutel: $2,42 \text{ mg/m}^3$

Die Berechnung der Substanzkonzentration wurde entsprechend der Formeln (6) und (7) aus Kapitel 3.2.1 vorgenommen.

Für die Vorversuche und die Darbietung der Proben an die Geruchsprüfer wurde jeweils derselbe 70 L Beutel verwendet.

4.15.1 Beschreibung des Prüferkollektivs

Die Überprüfung zur Erfüllung der in der DIN EN13725 festgelegten Anforderungen zur Bewertung von n-Butanol wurde vor der Probenbewertung durchgeführt. Individuelle Ergebnisse der einzelnen Prüfer sind in Tabelle 83 dargestellt.

Tabelle 83: Naphthalin – Prüferüberprüfung nach DIN EN 13725

Anforderungen für die Bewertung von n-Butanol $20 \leq 10^{\bar{y}_{ITE}} \leq 80$ und $10^{s_{ITE}} \leq 2,3$

Team	Prüfer	individuelle Empfindlichkeit $10^{\bar{y}_{ITE}}$ in ppb	individuelle maximale Streuung / Standard-abweichung $10^{s_{ITE}}$ in ppb	Kriterium Empfindlichkeit erfüllt	Kriterium Standard-abweichung erfüllt
A	BRL2	52,591	1,591	✓	✓
A	KOI	70,085	1,400	✓	✓
A	SCL	58,293	1,436	✓	✓

Team	Prüfer	individuelle Empfindlichkeit 10^{YTE} in ppb	individuelle maximale Streuung / Standard-abweichung 10^{SITE} in ppb	Kriterium Empfindlichkeit erfüllt	Kriterium Standard-abweichung erfüllt
A	SÜM	50,593	1,665	✓	✓
B	DOA	35,501	1,656	✓	✓
B	GÖR	40,729	1,434	✓	✓
B	MEC	36,777	1,538	✓	✓
B	MOF	34,214	1,804	✓	✓
C	JOA	56,786	1,534	✓	✓
C	LIM4	54,726	1,708	✓	✓
C	SAM	49,999	1,613	✓	✓
C	STB	38,275	1,288	✓	✓

Die Ergebnisse der drei Teams sind in Tabelle 84 zusammengestellt.

Tabelle 84: Naphthalin – Geruchsempfindlichkeit der Teams auf n-Butanol nach DIN EN 13725

Datum	Team	Empfindlichkeit in ppb	Präzision $r \leq 0,477$	Genauigkeit $A \leq 0,217$	Mess-leiter	Prüfer 1	Prüfer 2	Prüfer 3	Prüfer 4
24.05.2019	A	47,38	0,2823	0,0720	BES	BRL2	KOI	SCL	SÜM
28.05.2019	B	29,62	0,3169	0,0717	BES	DOA	GÖR	MEC	MOF
29.05.2019	C	33,34	0,3225	0,0689	BRL2	JOA	LIM4	SAM	STB

Sowohl alle Prüfer, als auch das gesamte Team, erfüllen damit die Anforderungen nach DIN EN 13725.

4.15.2 Geruchsstoffkonzentration

Für die Bestimmung der Geruchsstoffkonzentration wurden 12 Prüfer eingesetzt, die jeweils 10 gültige Schwellenschätzungen zur Bestimmung der Geruchsstoffkonzentration abgeben mussten. Diese 10 Schwellenschätzungen wurden auf jeweils drei Messungen aufgeteilt (vgl. Kapitel 3.2.4.1), sodass sich mit drei Teams insgesamt neun Messungen ergeben. Jede Messung erfüllte die normativen Anforderungen und wies ein $\Delta Z \leq 5$ auf.

Die ermittelten Geruchsstoffkonzentrationen für Naphthalin sind in der folgenden Tabelle 85 zusammengestellt. Die mittlere Geruchsstoffkonzentration der drei Teams liegt bei $1251 \text{ GE}_E/\text{m}^3$.

Tabelle 85: Naphthalin – Geruchsstoffkonzentration nach DIN EN 13725

Einzeldaten für jeden Prüfer und Durchgang, aufgeteilt auf jeweils drei Messungen unter Angabe des geometrischen Gesamtmittelwertes und des oberen und unteren Wertes in Abhängigkeit des 95% Konfidenzintervalls

Prüfer- kürzel / Durch- gang	Geruchsstoffkonzentration in GE _E /m ³											
	BRL2	KOI	SCL	SüM	MEC	MOF	DOA	GÖR	STB	SAM	LIM4	JOA
	Team A Messung 1				Team B Messung 1				Team C Messung 1			
1	2897	11593	5789	707	707	707	707	707	2897	2897	1425	707
2	5789	2897	5789	1425	707	707	1425	186	2897	2897	1425	707
3	1425	2897	2897	1425	707	356	1425	356	2897	2897	1425	707
	Team A Messung 2				Team B Messung 2				Team C Messung 2			
4	1425	2897	5789	707	707	2897	1425	356	2897	2897	707	707
5	2897	2897	2897	1425	356	1425	2897	356	2897	1425	1425	707
6	2897	2897	1425	707	707	707	1425	186	1425	1425	707	707
7	1425	1425	1425	707	707	356	707	707	1425	1425	1425	356
	Team A Messung 3				Team B Messung 3				Team C Messung 3			
8	2897	2897	1425	707	1425	707	1425	707	1425	2897	1425	707
9	2897	1425	1425	707	707	707	1425	356	1425	2897	1425	707
10	707	1425	1425	707	707	1425	1425	356	1425	1425	2897	707
Gesamtmittelwert (geometrisch)												1251
95% Konfidenzintervall unterer Wert												961
95% Konfidenzintervall oberer Wert												1629

Die Bewertungen der Geruchsstoffkonzentration sind sowohl innerhalb der Teams als auch teamübergreifend homogen.

4.15.3 Intensitäten und Weber-Fechner-Koeffizient

Aus den Einzelbewertungen der eingesetzten Prüfer (siehe Anhang A.1.14) ergibt sich durch die Datenaufbereitung entsprechend Kapitel 3.1.2 die Häufigkeit der Intensitätsüberschreitung bezüglich der zugehörigen logarithmierten Verdünnungszahlen wie in Tabelle 86 dargestellt.

Tabelle 86: Naphthalin – Zuordnung der Häufigkeiten der Intensitätsüberschreitungen zu den vorgegebenen Logarithmen der Verdünnungszahlen

log Z / Häufigkeit	3,9	3,6	3,3	3,0	2,7	2,4	2,1	1,5
$H(I>0)$	0,08	0,17	0,61	0,83	1,00	1,00	1,00	1,00
$H(I>1)$	0,00	0,00	0,17	0,42	0,67	1,00	1,00	1,00
$H(I>2)$	0,00	0,00	0,00	0,06	0,36	0,86	1,00	1,00
$H(I>3)$	0,00	0,00	0,00	0,00	0,03	0,36	0,75	1,00
$H(I>4)$	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,11	0,33	0,92
$H(I>5)$	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,50

Durch Auftragung der Intensitätshäufigkeiten über die logarithmierten Verdünnungszahlen ergeben sich für $H(I>0)$ bis $H(I>4)$ fünf einzelne Diagramme, aus denen sich die 16-, 50- und 84-Perzentile $\hat{Z}_{16}$, $\hat{Z}_{50}$ und $\hat{Z}_{84}$ graphisch ableiten lassen (siehe Tabelle 87).

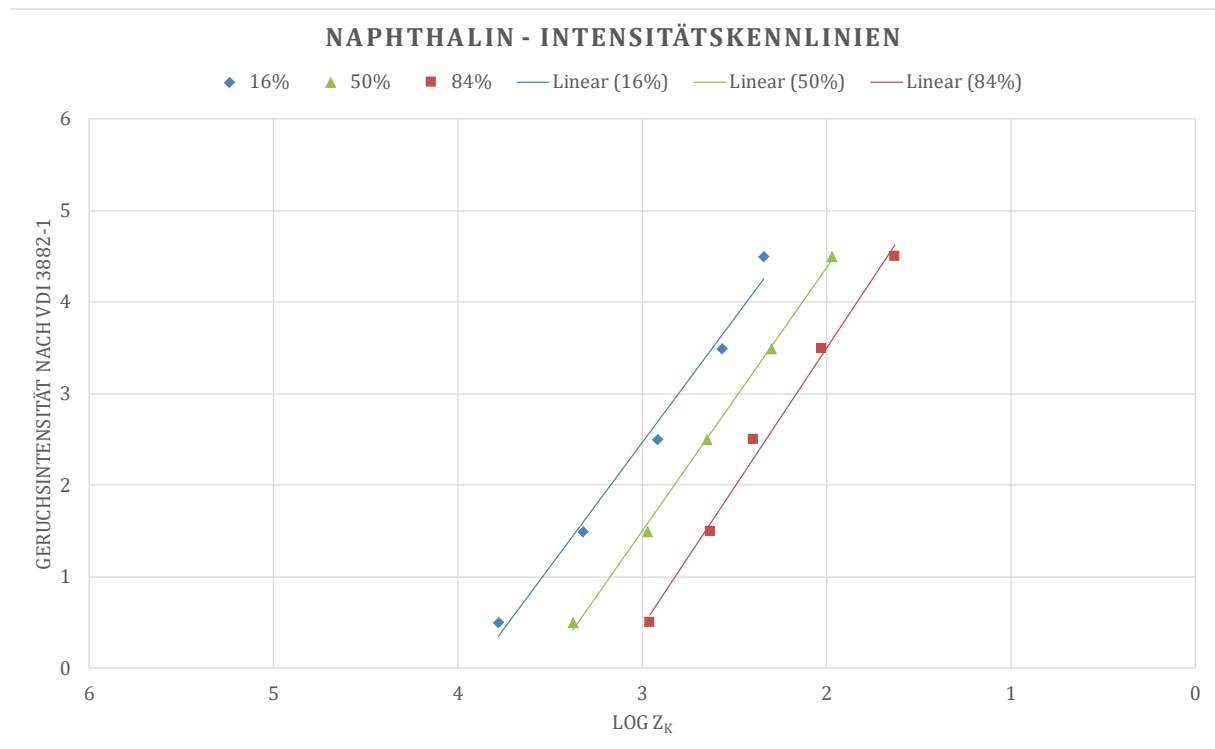
Tabelle 87: Naphthalin – Kenngrößen der Intensitätsstufen I_s

Graphisch ermittelt aus der Auftragung der Häufigkeiten der Intensitätsüberschreitung über die logarithmierten Verdünnungsstufen

I_s	$I = I_s + 0,5$	log Z_{16}	log Z_{50}	log Z_{84}
0	0,5	3,78	3,38	2,96
1	1,5	3,32	2,97	2,63
2	2,5	2,92	2,65	2,40
3	3,5	2,57	2,30	2,03
4	4,5	2,34	1,97	1,63

Durch Auftragung der Daten aus Tabelle 87 ergibt sich die folgende Abbildung 31.

Abbildung 31: Naphthalin – Intensitätskennlinien für $\hat{Z}_{16}$, $\hat{Z}_{50}$ und $\hat{Z}_{84}$ nach VDI 3882-1



Quelle: eigene Darstellung Olfasense GmbH

Die Parameter, die sich für diese Kennlinien ergeben sind in der folgenden Tabelle 88 zusammengestellt.

Tabelle 88: Naphthalin – Parameter der Geradengleichungen der 16-, 50- und 84-Perzentile

Angabe der Korrelationskoeffizienten R, der Bestimmtheitsmaße R^2 sowie der Steigung b und des Achsenabschnittes a

Parameter	Formelzeichen	◆ 16%	▲ 50%	■ 84%
Korrelationskoeffizient	R	-0,993	-0,999	-0,996
Bestimmtheitsmaß	R^2	0,986	0,998	0,992
Steigung	b	-2,72	-2,86	-3,04
Achsenabschnitt	a	10,61	10,09	9,59

Aus dieser Darstellung lässt sich der Weber-Fechner-Koeffizient mit $k_w = 2,86$ ableiten, sodass sich gemäß Formel (5) in Kapitel 3.1.2 der folgende Zusammenhang für Naphthalin ergibt:

$$I = 2,86 \cdot \log\left(\frac{c_R}{c_{GS}}\right) \quad (23)$$

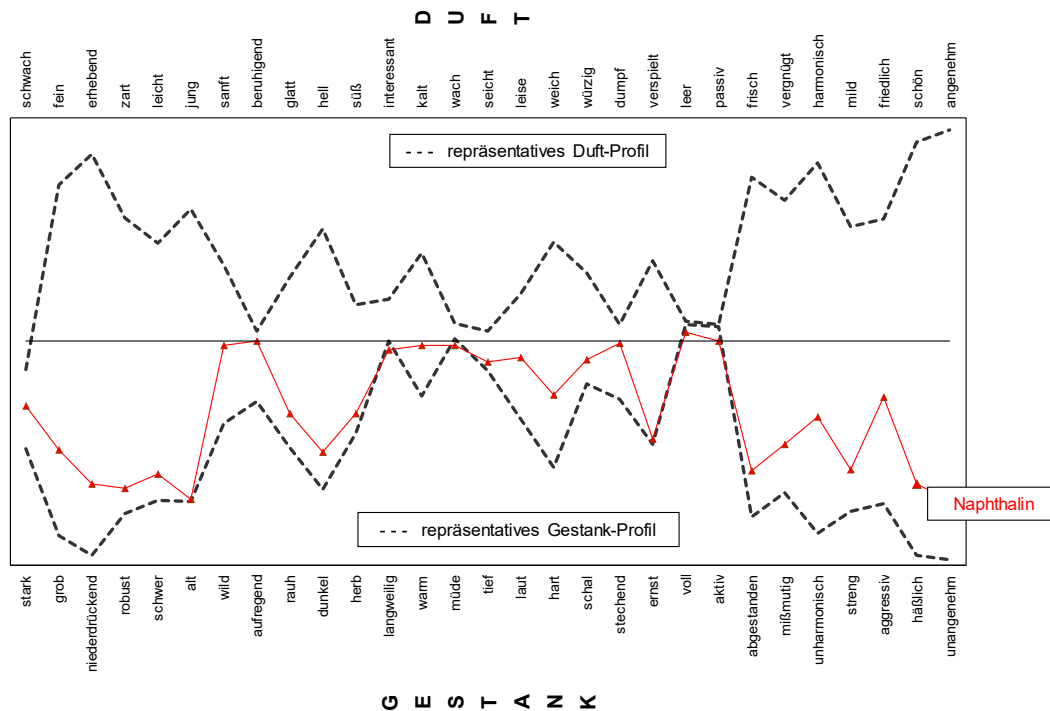
mit:

- I Intensität
- k_W Weber-Fechner-Koeffizient
- c_R Substanzkonzentration in der Riechprobe
- c_{GS} Substanzkonzentration an der Geruchsschwelle

4.15.4 Hedonische Geruchswirkung

Die hedonische Wirkung von Naphthalin ist in Abbildung 32 zusammen mit den repräsentativen Profilen für Duft und Gestank [VDI 3940-4] aufgetragen. Die Bewertung des Naphthalins wurde im Anschluss an die zweite Intensitätsbewertung (Punkt 9 Kapitel 3.2.4.1) vorgenommen, sodass den Prüfern der Geruch gegenwärtig war.

Abbildung 32: Naphthalin – Polaritätenprofil für Naphthalin, Duft und Gestank



repräsentative Profile für Duft und Gestank entsprechend der Daten aus VDI 3940-4

Quelle: Darstellung aus VDI 3940-4; ergänzt um substanzspezifische Daten

Der Produkt-Moment-Korrelationskoeffizient nach Pearson für das Konzept Duft ergibt sich zu -0,77. Für die Korrelation mit dem Konzept Gestank ergibt sich ein Wert von +0,89.

4.15.5 Geruchscharakter

Für die Bewertung des Geruchscharakters wurde Naphthalin mit einer Verdünnung von 1:137 in einen Nalophan®-Beutel überführt und von 5 Prüfern anhand des Charakters bewertet.

Während alle 5 Prüfer die Geruchsprobe als „muffig“ empfanden, wurde sie weiterhin vier Mal als „Mottenkugel“ beschrieben. Weiterhin wurde sie als „animalisch“ und „beißend“ beschrieben.

4.16 1-Methylnaphthalin

4.16.1 Probenaufbereitung

Die Probenaufbereitung wurde entsprechend der folgenden Parameter durchgeführt:

Beutelvolumen:	75 L
Vorbefüllung Probenbeutel:	7 L
Verdampfungstemperatur LiGaVa:	260°C
Substanzmenge injiziert:	1 µL
Flowrate nach Injektion:	1 L/min
Reinheit Substanz:	95%
Dichte Substanz:	1,02 g/cm ³
Aggregatzustand:	flüssig

resultierende rechnerische Konzentration im Mutterbeutel: 12,92 mg/m³

Die Berechnung der Substanzkonzentration wurde entsprechend der Formeln (6) und (7) aus Kapitel 3.2.1 vorgenommen.

Für die Vorversuche und die Darbietung der Proben an die Geruchsprüfer wurde jeweils derselbe 75 L Beutel verwendet.

4.16.2 Beschreibung des Prüferkollektivs

Die Überprüfung zur Erfüllung der in der DIN EN13725 festgelegten Anforderungen zur Bewertung von n-Butanol wurde vor der Probenbewertung durchgeführt. Individuelle Ergebnisse der einzelnen Prüfer sind in Tabelle 89 dargestellt.

Tabelle 89: 1-Methylnaphthalin – Prüferüberprüfung nach DIN EN 13725

Anforderungen für die Bewertung von n-Butanol $20 \leq 10^{\bar{y}_{ITE}} \leq 80$ und $10^{s_{ITE}} \leq 2,3$

Team	Prüfer	individuelle Empfindlichkeit $10^{\bar{y}_{ITE}}$ in ppb	individuelle maximale Streuung / Standard-abweichung $10^{s_{ITE}}$ in ppb	Kriterium Empfindlichkeit erfüllt	Kriterium Standard-abweichung erfüllt
A	JOA	58,828	1,543	✓	✓
A	KOI	62,928	1,438	✓	✓
A	LIM4	49,138	1,649	✓	✓
A	SCO	62,325	1,435	✓	✓
B	BOJ2	27,821	1,676	✓	✓
B	MOF	35,308	1,889	✓	✓

Team	Prüfer	individuelle Empfindlichkeit 10^{YTE} in ppb	individuelle maximale Streuung / Standardabweichung 10^{SITE} in ppb	Kriterium Empfindlichkeit erfüllt	Kriterium Standardabweichung erfüllt
B	SCS	44,077	1,762	✓	✓
B	THM	58,822	1,575	✓	✓
C	BRL2	50,908	1,653	✓	✓
C	DÖM	60,367	1,931	✓	✓
C	MEC	39,374	1,575	✓	✓
C	RAJ	27,205	1,501	✓	✓

Die Ergebnisse der drei Teams sind in Tabelle 90 zusammengestellt.

Tabelle 90: 1-Methylnaphthalin – Geruchsempfindlichkeit der Teams auf n-Butanol nach DIN EN 13725

Datum	Team	Empfindlichkeit in ppb	Präzision $r \leq 0,477$	Genauigkeit $A \leq 0,217$	Messleiter	Prüfer 1	Prüfer 2	Prüfer 3	Prüfer 4
11.06.2019	A	57,40	0,3360	0,0763	BRL2	JOA	KOI	LIM4	SCO
12.06.2019	B	54,69	0,3427	0,0804	BES	BOJ2	MOF	SCS	THM
12.06.2019	C	51,53	0,3422	0,0885	BES	BRL2	DÖM	MEC	RAJ

Sowohl alle Prüfer, als auch das gesamte Team, erfüllen damit die Anforderungen nach DIN EN 13725.

4.16.3 Geruchsstoffkonzentration

Für die Bestimmung der Geruchsstoffkonzentration wurden 12 Prüfer eingesetzt, die jeweils 10 gültige Schwellenschätzungen zur Bestimmung der Geruchsstoffkonzentration abgeben mussten. Diese 10 Schwellenschätzungen wurden auf jeweils drei Messungen aufgeteilt (vgl. Kapitel 3.2.4.1), sodass sich mit drei Teams insgesamt neun Messungen ergeben. Jede Messung erfüllte die normativen Anforderungen und wies ein $\Delta Z \leq 5$ auf.

Die ermittelten Geruchsstoffkonzentrationen für 1-Methylnaphthalin sind in der folgenden Tabelle 91 zusammengestellt. Die mittlere Geruchsstoffkonzentration der drei Teams liegt bei $1412 \text{ GE}_E/\text{m}^3$.

Tabelle 91: 1-Methylnaphthalin – Geruchsstoffkonzentration nach DIN EN 13725

Einzeldaten für jeden Prüfer und Durchgang, aufgeteilt auf jeweils drei Messungen unter Angabe des geometrischen Gesamtmittelwertes und des oberen und unteren Wertes in Abhängigkeit des 95% Konfidenzintervalls

Prüfer- kürzel / Durch- gang	Geruchsstoffkonzentration in GE _E /m ³											
	LIM4	KOI	SCO	JOA	BOJ2	THM	SCS	MOF	BRL2	DöM	MEC	RAJ
	Team A Messung 1				Team B Messung 1				Team C Messung 1			
1	1413	1413	2700	2700	1413	1413	2700	1413	2700	5085	1413	1413
2	691	1413	691	1413	1413	1413	2700	2700	2700	2700	2700	2700
3	691	2700	1413	1413	1413	338	1413	1413	1413	2700	1413	2700
	Team A Messung 2				Team B Messung 2				Team C Messung 2			
4	2700	1413	691	1413	2700	2700	5085	2700	2700	1413	2700	2700
5	2700	1413	691	691	2700	1413	5085	1413	2700	2700	1413	2700
6	1413	691	691	691	5085	1413	2700	2700	1413	691	691	1413
7	691	1413	1413	691	2700	1413	2700	1413	691	691	691	1413
	Team A Messung 3				Team B Messung 3				Team C Messung 3			
8	1413	338	691	691	2700	1413	1413	1413	691	2700	691	2700
9	1413	1413	691	338	2700	691	1413	1413	1413	1413	691	1413
10	691	691	338	338	2700	691	1413	1413	691	2700	691	691
Gesamtmittelwert (geometrisch)												1412
95% Konfidenzintervall unterer Wert												1084
95% Konfidenzintervall oberer Wert												1839

Die Bewertungen der Geruchsstoffkonzentration sind sowohl innerhalb der Teams als auch teamübergreifend homogen.

4.16.4 Intensitäten und Weber-Fechner-Koeffizient

Aus den Einzelbewertungen der eingesetzten Prüfer (siehe Anhang A.1.15) ergibt sich durch die Datenaufbereitung entsprechend Kapitel 3.1.2 die Häufigkeit der Intensitätsüberschreitung bezüglich der zugehörigen logarithmierten Verdünnungszahlen wie in Tabelle 92 dargestellt.

Tabelle 92: 1-Methylnaphthalin – Zuordnung der Häufigkeiten der Intensitätsüberschreitungen zu den vorgegebenen Logarithmen der Verdünnungszahlen

log Z / Häufigkeit	3,6	3,3	3,0	2,7	2,4	2,1	1,8	1,2
$H(I>0)$	0,11	0,36	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00
$H(I>1)$	0,00	0,06	0,56	0,86	1,00	1,00	1,00	1,00
$H(I>2)$	0,00	0,00	0,08	0,42	0,83	0,97	1,00	1,00
$H(I>3)$	0,00	0,00	0,00	0,03	0,19	0,69	1,00	1,00
$H(I>4)$	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,17	0,61	0,97
$H(I>5)$	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,11	0,53

Durch Auftragung der Intensitätshäufigkeiten über die logarithmierten Verdünnungszahlen ergeben sich für $H(I>0)$ bis $H(I>4)$ fünf einzelne Diagramme, aus denen sich die 16-, 50- und 84-Perzentile $\hat{Z}_{16}$, $\hat{Z}_{50}$ und $\hat{Z}_{84}$ graphisch ableiten lassen (siehe Tabelle 93).

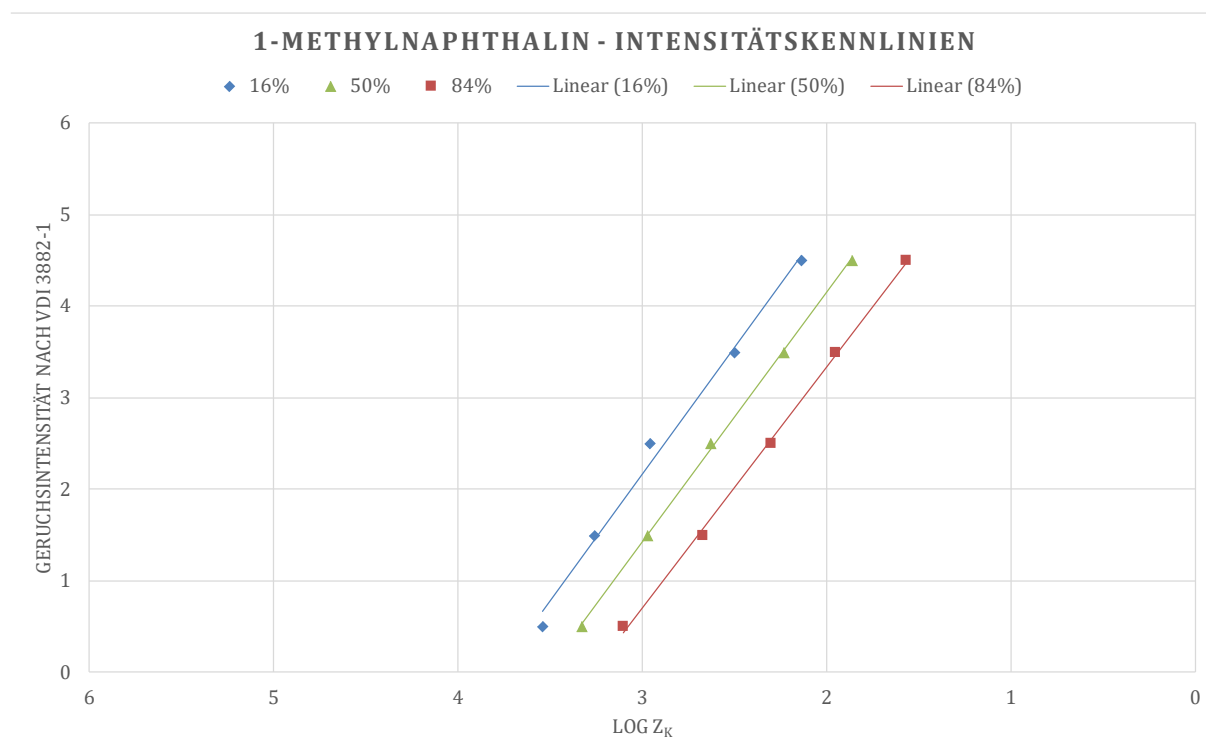
Tabelle 93: 1-Methylnaphthalin – Kenngrößen der Intensitätsstufen I_s

Graphisch ermittelt aus der Auftragung der Häufigkeiten der Intensitätsüberschreitung über die logarithmierten Verdünnungsstufen

I_s	$I = I_s + 0,5$	log Z_{16}	log Z_{50}	log Z_{84}
0	0,5	3,54	3,33	3,10
1	1,5	3,26	2,97	2,67
2	2,5	2,96	2,63	2,30
3	3,5	2,50	2,23	1,95
4	4,5	2,14	1,86	1,57

Durch Auftragung der Daten aus Tabelle 93 ergibt sich die folgende Abbildung 33.

Abbildung 33: 1-Methylnaphthalin – Intensitätskennlinien für Ž16, Ž50 und Ž84 nach VDI 3882-1



Quelle: eigene Darstellung Olfasense GmbH

Die Parameter, die sich für diese Kennlinien ergeben sind in der folgenden Tabelle 94 zusammengestellt.

Tabelle 94: 1-Methylnaphthalin – Parameter der Geradengleichungen der 16-, 50- und 84-Perzentile

Angabe der Korrelationskoeffizienten R, der Bestimmtheitsmaße R² sowie der Steigung b und des Achsenabschnittes a

Parameter	Formelzeichen	◆ 16%	▲ 50%	■ 84%
Korrelationskoeffizient	R	-0,996	-1,000	-0,999
Bestimmtheitsmaß	R ²	0,991	0,999	0,999
Steigung	b	-2,78	-2,72	-2,64
Achsenabschnitt	a	10,52	9,57	8,62

Aus dieser Darstellung lässt sich der Weber-Fechner-Koeffizient mit $k_w = 2,72$ ableiten, sodass sich gemäß Formel (5) in Kapitel 3.1.2 der folgende Zusammenhang für 1-Methylnaphthalin ergibt:

$$I = 2,72 \cdot \log\left(\frac{c_R}{c_{GS}}\right) \quad (24)$$

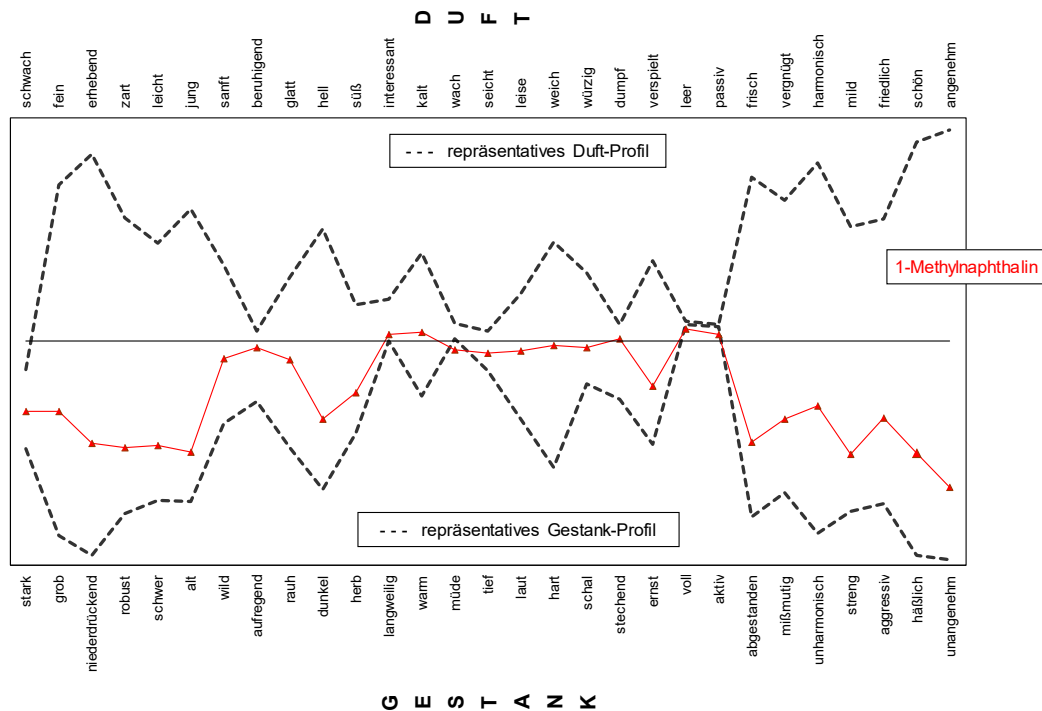
mit:

- I Intensität
- k_W Weber-Fechner-Koeffizient
- c_R Substanzkonzentration in der Riechprobe
- c_{GS} Substanzkonzentration an der Geruchsschwelle

4.16.5 Hedonische Geruchswirkung

Die hedonische Wirkung von 1-Methylnaphthalin ist in Abbildung 34 zusammen mit den repräsentativen Profilen für Duft und Gestank [VDI 3940-4] aufgetragen. Die Bewertung des 1-Methylnaphthalins wurde im Anschluss an die zweite Intensitätsbewertung (Punkt 9 Kapitel 3.2.4.1) vorgenommen, sodass den Prüfern der Geruch gegenwärtig war.

Abbildung 34: 1-Methylnaphthalin – Polaritätenprofil für 1-Methylnaphthalin, Duft und Gestank



repräsentative Profile für Duft und Gestank entsprechend der Daten aus VDI 3940-4

Quelle: Darstellung aus VDI 3940-4; ergänzt um substanzspezifische Daten

Der Produkt-Moment-Korrelationskoeffizient nach Pearson für das Konzept Duft ergibt sich zu -0,75. Für die Korrelation mit dem Konzept Gestank ergibt sich ein Wert von +0,89.

4.16.6 Geruchscharakter

Für die Bewertung des Geruchscharakters wurde 1-Methylnaphthalin mit einer Verdünnung von 1:85 in einen Nalophan®-Beutel überführt und von 5 Prüfern anhand des Charakters bewertet.

Alle 5 Prüfer beschrieben die Geruchsprobe als „muffig“. Vier Prüfer beschrieben die Probe weiterhin als „Mottenkugel“. Weitere Beschreibungen waren „animalisch“, „staubig“ und „modrig“.

4.17 2-Methylnaphthalin

4.17.1 Probenaufbereitung

Die Probenaufbereitung wurde entsprechend der folgenden Parameter durchgeführt:

Beutelvolumen:	80 L
Vorbefüllung Probenbeutel:	8 L
Verdampfungstemperatur LiGaVa:	250°C
Substanzmenge injiziert:	30 µL
Flowrate nach Injektion:	1 L/min
Reinheit Substanz:	100%
Dichte Substanz:	1,006 g/cm ³
Aggregatzustand:	fest
Lösungsmittel:	Isopropanol
Gelöste Substanzmenge:	53 mg
Volumen Lösungsmittel:	5 ml

resultierende rechnerische Konzentration im Mutterbeutel: $3,98 \text{ mg/m}^3$

Die Berechnung der Substanzkonzentration wurde entsprechend der Formeln (6) und (7) aus Kapitel 3.2.1 vorgenommen.

Für die Vorversuche und die Darbietung der Proben an die Geruchsprüfer wurde jeweils derselbe 80 L Beutel verwendet.

4.17.2 Beschreibung des Prüferkollektivs

Die Überprüfung zur Erfüllung der in der DIN EN13725 festgelegten Anforderungen zur Bewertung von n-Butanol wurde vor der Probenbewertung durchgeführt. Individuelle Ergebnisse der einzelnen Prüfer sind in Tabelle 95 dargestellt.

Tabelle 95: 2-Methylnaphthalin – Prüferüberprüfung nach DIN EN 13725

Anforderungen für die Bewertung von n-Butanol $20 \leq 10^{\bar{y}_{ITE}} \leq 80$ und $10^{s_{ITE}} \leq 2,3$

Team	Prüfer	individuelle Empfindlichkeit $10^{\bar{y}_{ITE}}$ in ppb	individuelle maximale Streuung / Standard-abweichung $10^{s_{ITE}}$ in ppb	Kriterium Empfindlichkeit erfüllt	Kriterium Standard-abweichung erfüllt
A	KOI	65,188	1,532	✓	✓
A	SAM	59,019	1,537	✓	✓
A	SCS	52,721	1,968	✓	✓

Team	Prüfer	individuelle Empfindlichkeit 10^{YTE} in ppb	individuelle maximale Streuung / Standardabweichung 10^{SITE} in ppb	Kriterium Empfindlichkeit erfüllt	Kriterium Standardabweichung erfüllt
A	STB	40,889	1,441	✓	✓
B	ADM	58,332	1,495	✓	✓
B	ADS	42,037	1,498	✓	✓
B	KÖD	41,910	1,594	✓	✓
B	MEC	38,406	1,588	✓	✓
C	DÖM	67,273	1,786	✓	✓
C	RAJ	30,367	1,413	✓	✓
C	SCO	58,220	1,437	✓	✓
C	STS	40,699	1,530	✓	✓

Die Ergebnisse der drei Teams sind in Tabelle 96 zusammengestellt.

Tabelle 96: 2-Methylnaphthalin – Geruchsempfindlichkeit der Teams auf n-Butanol nach DIN EN 13725

Datum	Team	Empfindlichkeit in ppb	Präzision $r \leq 0,477$	Genauigkeit $A \leq 0,217$	Messleiter	Prüfer 1	Prüfer 2	Prüfer 3	Prüfer 4
26.06.2019	A	87,11	0,3817	0,1166	BRL2	KOI	SAM	SCS	STB
27.06.2019	B	32,90	0,3837	0,1163	BRL2	ADM	ADS	KÖD	MEC
27.06.2019	C	54,38	0,3823	0,1241	BES	DÖM	RAJ	SCO	STS

Sowohl alle Prüfer, als auch das gesamte Team, erfüllen damit die Anforderungen nach DIN EN 13725.

4.17.3 Geruchsstoffkonzentration

Für die Bestimmung der Geruchsstoffkonzentration wurden 12 Prüfer eingesetzt, die jeweils 10 gültige Schwellenschätzungen zur Bestimmung der Geruchsstoffkonzentration abgeben mussten. Diese 10 Schwellenschätzungen wurden auf jeweils drei Messungen aufgeteilt (vgl. Kapitel 3.2.4.1), sodass sich mit drei Teams insgesamt neun Messungen ergeben. Jede Messung erfüllte die normativen Anforderungen und wies ein $\Delta Z \leq 5$ auf.

Die ermittelten Geruchsstoffkonzentrationen für 2-Methylnaphthalin sind in der folgenden Tabelle 97 zusammengestellt. Die mittlere Geruchsstoffkonzentration der drei Teams liegt bei $729 \text{ GE}_E/\text{m}^3$.

Tabelle 97: 2-Methylnaphthalin – Geruchsstoffkonzentration nach DIN EN 13725

Einzeldaten für jeden Prüfer und Durchgang, aufgeteilt auf jeweils drei Messungen unter Angabe des geometrischen Gesamtmittelwertes und des oberen und unteren Wertes in Abhängigkeit des 95% Konfidenzintervalls

Prüfer- kürzel / Durch- gang	Geruchsstoffkonzentration in GE _E /m ³											
	SAM	KOI	STB	SCS	ADS	ADM	MEC	KöD	STS	DöM	RAJ	SCO
	Team A Messung 1				Team B Messung 1				Team C Messung 1			
1	691	1413	1413	1413	1413	2700	691	691	691	2700	1413	1413
2	1413	338	1413	691	1413	1413	1413	691	1413	691	691	1413
3	691	338	691	691	1413	1413	691	338	1413	1413	1413	691
	Team A Messung 2				Team B Messung 2				Team C Messung 2			
4	691	691	1413	1413	1413	1413	338	691	1413	691	691	691
5	691	691	1413	691	1413	1413	691	338	691	691	691	691
6	691	691	1413	1413	691	1413	338	338	338	691	691	691
7	691	691	691	691	338	1413	338	338	691	169	691	691
	Team A Messung 3				Team B Messung 3				Team C Messung 3			
8	691	691	691	691	691	1413	691	338	691	691	691	1413
9	691	691	691	338	691	691	338	169	691	338	691	1413
10	338	338	691	338	691	691	338	338	338	338	338	338
Gesamtmittelwert (geometrisch)												729
95% Konfidenzintervall unterer Wert												560
95% Konfidenzintervall oberer Wert												949

Die Bewertungen der Geruchsstoffkonzentration sind sowohl innerhalb der Teams als auch teamübergreifend homogen.

4.17.4 Intensitäten und Weber-Fechner-Koeffizient

Aus den Einzelbewertungen der eingesetzten Prüfer (siehe Anhang A.1.16) ergibt sich durch die Datenaufbereitung entsprechend Kapitel 3.1.2 die Häufigkeit der Intensitätsüberschreitung bezüglich der zugehörigen logarithmierten Verdünnungszahlen wie in Tabelle 98 dargestellt.

Tabelle 98: 2-Methylnaphthalin – Zuordnung der Häufigkeiten der Intensitätsüberschreitungen zu den vorgegebenen Logarithmen der Verdünnungszahlen

log Z / Häufigkeit	3,3	3,0	2,7	2,4	2,1	1,8	1,5	0,9
$H(I > 0)$	0,00	0,47	0,75	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00
$H(I > 1)$	0,00	0,00	0,31	0,94	1,00	1,00	1,00	1,00
$H(I > 2)$	0,00	0,00	0,03	0,44	0,94	1,00	1,00	1,00
$H(I > 3)$	0,00	0,00	0,00	0,00	0,47	0,78	1,00	1,00
$H(I > 4)$	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,14	0,86	1,00
$H(I > 5)$	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,14	0,83

Durch Auftragung der Intensitätshäufigkeiten über die logarithmierten Verdünnungszahlen ergeben sich für $H(I > 0)$ bis $H(I > 4)$ fünf einzelne Diagramme, aus denen sich die 16-, 50- und 84-Perzentile $\hat{Z}_{16}$, $\hat{Z}_{50}$ und $\hat{Z}_{84}$ graphisch ableiten lassen (siehe Tabelle 99).

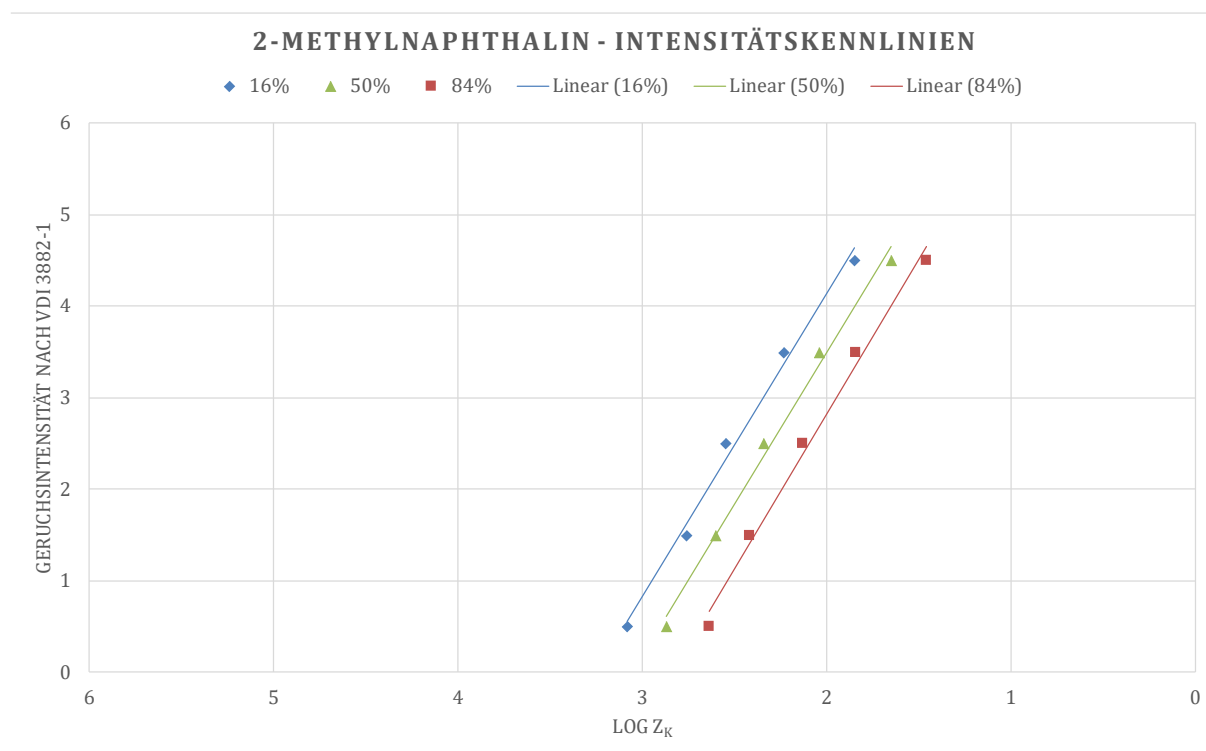
Tabelle 99: 2-Methylnaphthalin – Kenngrößen der Intensitätsstufen I_s

Graphisch ermittelt aus der Auftragung der Häufigkeiten der Intensitätsüberschreitung über die logarithmierten Verdünnungsstufen

I_s	$I = I_s + 0,5$	log Z_{16}	log Z_{50}	log Z_{84}
0	0,5	3,08	2,87	2,64
1	1,5	2,76	2,60	2,42
2	2,5	2,55	2,34	2,13
3	3,5	2,23	2,04	1,84
4	4,5	1,85	1,65	1,46

Durch Auftragung der Daten aus Tabelle 99 ergibt sich die folgende Abbildung 35.

Abbildung 35: 2-Methylnaphthalin – Intensitätskennlinien für Ž16, Ž50 und Ž84 nach VDI 3882-1



Quelle: eigene Darstellung Olfasense GmbH

Die Parameter, die sich für diese Kennlinien ergeben sind in der folgenden Tabelle 100 zusammengestellt.

Tabelle 100: 2-Methylnaphthalin – Parameter der Geradengleichungen der 16-, 50- und 84-Perzentile

Angabe der Korrelationskoeffizienten R, der Bestimmtheitsmaße R² sowie der Steigung b und des Achsenabschnittes a

Parameter	Formelzeichen	◆ 16%	▲ 50%	■ 84%
Korrelationskoeffizient	R	-0,996	-0,996	-0,996
Bestimmtheitsmaß	R ²	0,991	0,993	0,991
Steigung	b	-3,32	-3,31	-3,37
Achsenabschnitt	a	10,77	10,11	9,57

Aus dieser Darstellung lässt sich der Weber-Fechner-Koeffizient mit $k_w = 3,31$ ableiten, sodass sich gemäß Formel (5) in Kapitel 3.1.2 der folgende Zusammenhang für 2-Methylnaphthalin ergibt:

$$I = 3,31 \cdot \log\left(\frac{c_R}{c_{GS}}\right) \quad (25)$$

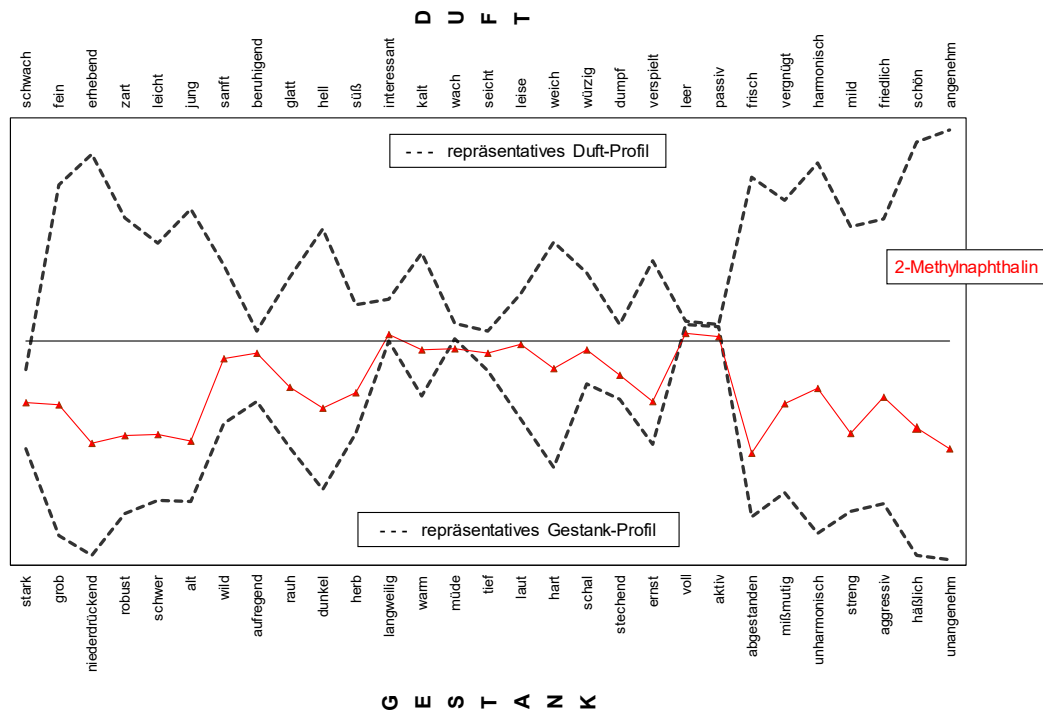
mit:

- I Intensität
- k_W Weber-Fechner-Koeffizient
- c_R Substanzkonzentration in der Riechprobe
- c_{GS} Substanzkonzentration an der Geruchsschwelle

4.17.5 Hedonische Geruchswirkung

Die hedonische Wirkung von 2-Methylnaphthalin ist in Abbildung 36 zusammen mit den repräsentativen Profilen für Duft und Gestank [VDI 3940-4] aufgetragen. Die Bewertung des 2-Methylnaphthalins wurde im Anschluss an die zweite Intensitätsbewertung (Punkt 9 Kapitel 3.2.4.1) vorgenommen, sodass den Prüfern der Geruch gegenwärtig war.

Abbildung 36: 2-Methylnaphthalin – Polaritätenprofil für 2-Methylnaphthalin, Duft und Gestank



repräsentative Profile für Duft und Gestank entsprechend der Daten aus VDI 3940-4

Quelle: Darstellung aus VDI 3940-4; ergänzt um substanzspezifische Daten

Der Produkt-Moment-Korrelationskoeffizient nach Pearson für das Konzept Duft ergibt sich zu -0,72. Für die Korrelation mit dem Konzept Gestank ergibt sich ein Wert von +0,89.

4.17.6 Geruchscharakter

Für die Bewertung des Geruchscharakters wurde 2-Methylnaphthalin mit einer Verdünnung von 1:23 in einen Nalophan®-Beutel überführt und von 5 Prüfern anhand des Charakters bewertet.

Alle 5 Prüfer beschrieben die Geruchsprobe als „muffig“. Je drei Prüfer empfanden die Probe weiterhin als „künstlich“, „chemisch“ und „animalisch“. Weitere Beschreibungen waren „verbrannt“, „modrig“ und „streng“.

4.18 1,4-Dimethylnaphthalin

4.18.1 Probenaufbereitung

Die Probenaufbereitung wurde entsprechend der folgenden Parameter durchgeführt:

Beutelvolumen:	80 L
Vorbefüllung Probenbeutel:	8 L
Verdampfungstemperatur LiGaVa:	275°C
Substanzmenge injiziert:	2 µL
Flowrate nach Injektion:	1 L/min
Reinheit Substanz:	95%
Dichte Substanz:	1,016 g/cm ³
Aggregatzustand:	flüssig

resultierende rechnerische Konzentration im Mutterbeutel: 24,1 mg/m³

Die Berechnung der Substanzkonzentration wurde entsprechend der Formeln (6) und (7) aus Kapitel 3.2.1 vorgenommen.

Für die Vorversuche und die Darbietung der Proben an die Geruchsprüfer wurde jeweils derselbe 80 L Beutel verwendet.

4.18.2 Beschreibung des Prüferkollektivs

Die Überprüfung zur Erfüllung der in der DIN EN13725 festgelegten Anforderungen zur Bewertung von n-Butanol wurde vor der Probenbewertung durchgeführt. Individuelle Ergebnisse der einzelnen Prüfer sind in Tabelle 101 dargestellt.

Tabelle 101: 1,4-Dimethylnaphthalin – Prüferüberprüfung nach DIN EN 13725

Anforderungen für die Bewertung von n-Butanol $20 \leq 10^{\bar{y}_{ITE}} \leq 80$ und $10^{s_{ITE}} \leq 2,3$

Team	Prüfer	individuelle Empfindlichkeit $10^{\bar{y}_{ITE}}$ in ppb	individuelle maximale Streuung / Standard-abweichung $10^{s_{ITE}}$ in ppb	Kriterium Empfindlichkeit erfüllt	Kriterium Standard-abweichung erfüllt
A	ELS	55,725	1,930	✓	✓
A	GIJ	39,817	1,551	✓	✓
A	KOR	30,839	1,619	✓	✓
A	TÄM	45,482	1,808	✓	✓
B	MOF	43,947	1,956	✓	✓
B	NIN	47,870	1,421	✓	✓

Team	Prüfer	individuelle Empfindlichkeit 10^{YTE} in ppb	individuelle maximale Streuung / Standardabweichung 10^{SITE} in ppb	Kriterium Empfindlichkeit erfüllt	Kriterium Standardabweichung erfüllt
B	SCL	56,153	1,428	✓	✓
B	SCO	59,351	1,434	✓	✓
C	BEA	38,044	1,830	✓	✓
C	DOA	32,065	1,507	✓	✓
C	JOA	52,764	1,602	✓	✓
C	THM	57,849	1,648	✓	✓

Die Ergebnisse der drei Teams sind in Tabelle 102 zusammengestellt.

Tabelle 102: 1,4-Dimethylnaphthalin – Geruchsempfindlichkeit der Teams auf n-Butanol nach DIN EN 13725

Datum	Team	Empfindlichkeit in ppb	Präzision $r \leq 0,477$	Genauigkeit $A \leq 0,217$	Messleiter	Prüfer 1	Prüfer 2	Prüfer 3	Prüfer 4
16.07.2019	A	44,75	0,3823	0,1227	BRL2	ELS	GIJ	KOR	TÄM
31.07.2019	B	53,29	0,3827	0,1210	BEA	MOF	NIN	SCL	SCO
19.07.2019	C	39,73	0,4032	0,1071	BRL2	BEA	DOA	JOA	THM

Sowohl alle Prüfer, als auch das gesamte Team, erfüllen damit die Anforderungen nach DIN EN 13725.

4.18.3 Geruchsstoffkonzentration

Für die Bestimmung der Geruchsstoffkonzentration wurden 12 Prüfer eingesetzt, die jeweils 10 gültige Schwellenschätzungen zur Bestimmung der Geruchsstoffkonzentration abgeben mussten. Diese 10 Schwellenschätzungen wurden auf jeweils drei Messungen aufgeteilt (vgl. Kapitel 3.2.4.1), sodass sich mit drei Teams insgesamt neun Messungen ergeben. Jede Messung erfüllte die normativen Anforderungen und wies ein $\Delta Z \leq 5$ auf.

Die ermittelten Geruchsstoffkonzentrationen für 1,4-Dimethylnaphthalin sind in der folgenden Tabelle 103 zusammengestellt. Die mittlere Geruchsstoffkonzentration der drei Teams liegt bei $667 \text{ GE}_E/\text{m}^3$.

Tabelle 103: 1,4-Dimethylnaphthalin – Geruchsstoffkonzentration nach DIN EN 13725

Einzeldaten für jeden Prüfer und Durchgang, aufgeteilt auf jeweils drei Messungen unter Angabe des geometrischen Gesamtmittelwertes und des oberen und unteren Wertes in Abhängigkeit des 95% Konfidenzintervalls

Prüfer- kürzel / Durch- gang	Geruchsstoffkonzentration in GE _E /m ³											
	KOR	TäM	ELS	GIJ	MOF	SCL	NIN	SCO	BEA	THM	JOA	DOA
	Team A Messung 1				Team B Messung 1				Team C Messung 1			
1	1425	1425	356	707	1425	707	2897	1425	707	707	707	1425
2	1425	2897	707	356	707	707	2897	1425	1425	707	356	707
3	1425	1425	186	707	707	707	2897	707	707	707	356	707
	Team A Messung 2				Team B Messung 2				Team C Messung 2			
4	1425	707	707	707	356	356	707	707	707	707	707	707
5	2897	707	707	707	186	707	707	707	356	707	707	2897
6	707	1425	707	356	1425	356	707	707	707	707	356	1425
7	707	707	356	707	356	356	356	356	1425	356	186	707
	Team A Messung 3				Team B Messung 3				Team C Messung 3			
8	1425	1425	356	356	356	356	356	356	707	707	356	707
9	707	356	356	356	356	356	707	356	1425	356	356	707
10	707	707	356	707	356	356	356	356	1425	707	707	707
Gesamtmittelwert (geometrisch)												667
95% Konfidenzintervall unterer Wert												512
95% Konfidenzintervall oberer Wert												869

Die Bewertungen der Geruchsstoffkonzentration sind sowohl innerhalb der Teams als auch teamübergreifend homogen.

4.18.4 Intensitäten und Weber-Fechner-Koeffizient

Aus den Einzelbewertungen der eingesetzten Prüfer (siehe Anhang A.1.17) ergibt sich durch die Datenaufbereitung entsprechend Kapitel 3.1.2 die Häufigkeit der Intensitätsüberschreitung bezüglich der zugehörigen logarithmierten Verdünnungszahlen wie in Tabelle 104 dargestellt.

Tabelle 104: 1,4-Dimethylnaphthalin – Zuordnung der Häufigkeiten der Intensitätsüberschreitungen zu den vorgegebenen Logarithmen der Verdünnungszahlen

log Z / Häufigkeit	3,3	3,0	2,7	2,4	2,1	1,8	1,5	1,3
$H(I>0)$	0,50	0,53	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00
$H(I>1)$	0,08	0,08	0,69	0,81	0,97	1,00	1,00	1,00
$H(I>2)$	0,00	0,00	0,28	0,44	0,78	1,00	1,00	1,00
$H(I>3)$	0,00	0,00	0,06	0,06	0,36	0,69	1,00	1,00
$H(I>4)$	0,00	0,00	0,00	0,00	0,11	0,36	0,53	0,81
$H(I>5)$	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,03	0,17	0,33

Durch Auftragung der Intensitätshäufigkeiten über die logarithmierten Verdünnungszahlen ergeben sich für $H(I>0)$ bis $H(I>4)$ fünf einzelne Diagramme, aus denen sich die 16-, 50- und 84-Perzentile $\hat{Z}_{16}$, $\hat{Z}_{50}$ und $\hat{Z}_{84}$ graphisch ableiten lassen (siehe Tabelle 105).

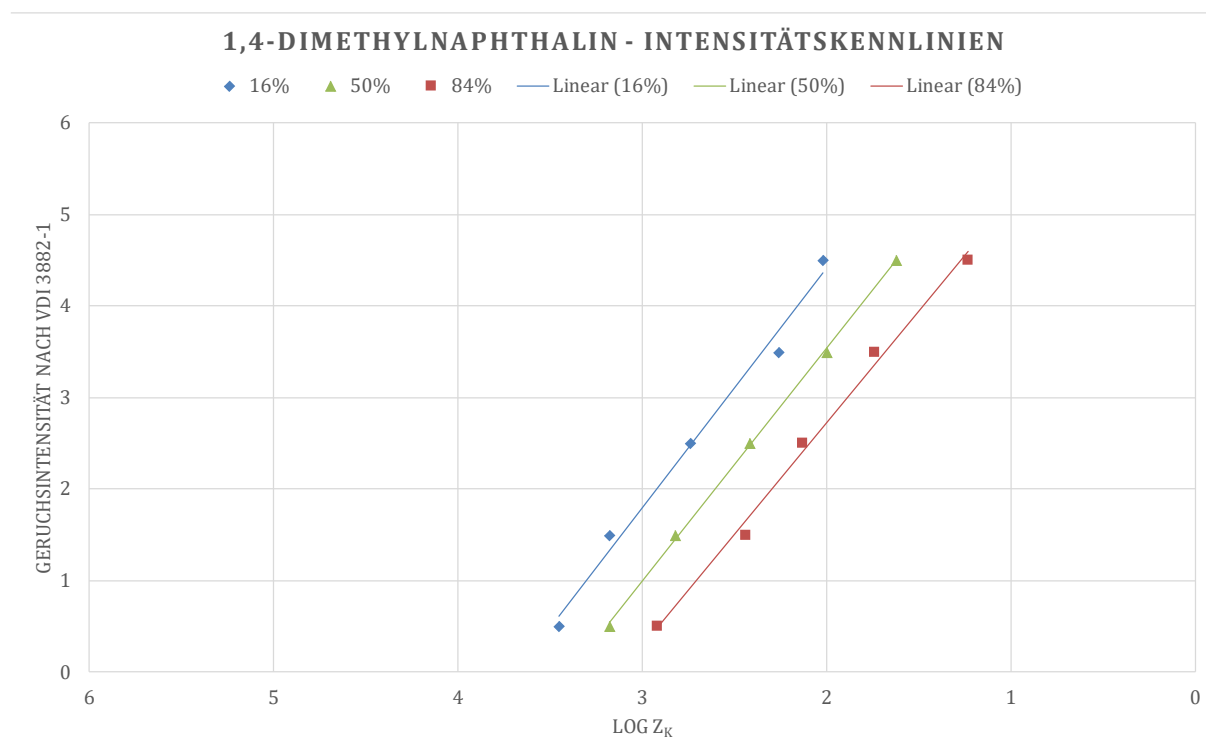
Tabelle 105: 1,4-Dimethylnaphthalin – Kenngrößen der Intensitätsstufen I_s

Graphisch ermittelt aus der Auftragung der Häufigkeiten der Intensitätsüberschreitung über die logarithmierten Verdünnungsstufen

I_s	$I = I_s + 0,5$	log Z_{16}	log Z_{50}	log Z_{84}
0	0,5	3,45	3,18	2,92
1	1,5	3,18	2,82	2,44
2	2,5	2,74	2,42	2,13
3	3,5	2,26	2,00	1,74
4	4,5	2,02	1,62	1,23

Durch Auftragung der Daten aus Tabelle 105 ergibt sich die folgende Abbildung 37.

Abbildung 37: 1,4-Dimethylnaphthalin - Intensitätskennlinien für Ž16, Ž50 und Ž84 nach VDI 3882-1



Quelle: eigene Darstellung Olfasense GmbH

Die Parameter, die sich für diese Kennlinien ergeben sind in der folgenden Tabelle 106 zusammengestellt.

Tabelle 106: 1,4-Dimethylnaphthalin – Parameter der Geradengleichungen der 16-, 50- und 84-Perzentile

Angabe der Korrelationskoeffizienten R, der Bestimmtheitsmaße R² sowie der Steigung b und des Achsenabschnittes a

Parameter	Formelzeichen	◆ 16%	▲ 50%	■ 84%
Korrelationskoeffizient	R	-0,994	-1,000	-0,997
Bestimmtheitsmaß	R ²	0,988	0,999	0,994
Steigung	b	-2,61	-2,54	-2,44
Achsenabschnitt	a	9,64	8,61	7,60

Aus dieser Darstellung lässt sich der Weber-Fechner-Koeffizient mit $k_w = 2,54$ ableiten, sodass sich gemäß Formel (5) in Kapitel 3.1.2 der folgende Zusammenhang für 1,4-Dimethylnaphthalin ergibt:

$$I = 2,54 \cdot \log\left(\frac{c_R}{c_{GS}}\right) \quad (26)$$

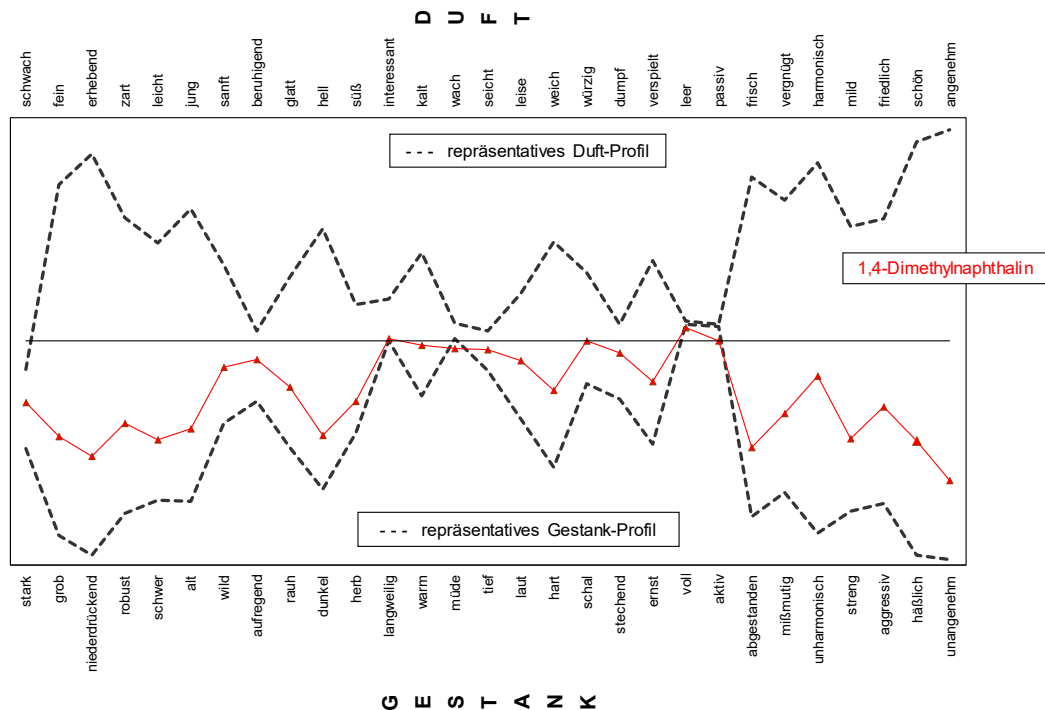
mit:

- I Intensität
- k_W Weber-Fechner-Koeffizient
- c_R Substanzkonzentration in der Riechprobe
- c_{GS} Substanzkonzentration an der Geruchsschwelle

4.18.5 Hedonische Geruchswirkung

Die hedonische Wirkung von 1,4-Dimethylnaphthalin ist in Abbildung 38 zusammen mit den repräsentativen Profilen für Duft und Gestank [VDI 3940-4] aufgetragen. Die Bewertung des 1,4-Dimethylnaphthalins wurde im Anschluss an die zweite Intensitätsbewertung (Punkt 9 Kapitel 3.2.4.1) vorgenommen, sodass den Prüfern der Geruch gegenwärtig war.

Abbildung 38: 1,4-Dimethylnaphthalin – Polaritätenprofil für 1,4-Dimethylnaphthalin, Duft und Gestank



repräsentative Profile für Duft und Gestank entsprechend der Daten aus VDI 3940-4

Quelle: Darstellung aus VDI 3940-4; ergänzt um substanzspezifische Daten

Der Produkt-Moment-Korrelationskoeffizient nach Pearson für das Konzept Duft ergibt sich zu -0,76. Für die Korrelation mit dem Konzept Gestank ergibt sich ein Wert von +0,91.

4.18.6 Geruchsscharakter

Für die Bewertung des Geruchsscharakters wurde 1,4-Dimethylnaphthalin mit einer Verdünnung von 1:35 in einen Nalophan®-Beutel überführt und von 5 Prüfern anhand des Charakters bewertet.

Alle 5 Prüfer beschrieben die Geruchsprobe als „muffig“ bzw. „modrig“. Je drei Prüfer empfanden die Probe weiterhin als „chemisch“ und „teerig“ und „stechend“.

4.19 Caprolactam

4.19.1 Probenaufbereitung

Die Probenaufbereitung wurde entsprechend der folgenden Parameter durchgeführt:

Beutelvolumen:	80 L
Vorbefüllung Probenbeutel:	8 L
Verdampfungstemperatur LiGaVa:	280°C
Substanzmenge injiziert:	32 µL
Flowrate nach Injektion:	1 L/min
Reinheit Substanz:	99%
Dichte Substanz:	1,02 g/cm ³
Aggregatzustand:	fest
Lösungsmittel:	Wasser
Gelöste Substanzmenge:	307,5 mg
Volumen Lösungsmittel:	5 ml

resultierende rechnerische Konzentration im Mutterbeutel: $24,35 \text{ mg/m}^3$

Die Berechnung der Substanzkonzentration wurde entsprechend der Formeln (6) und (7) aus Kapitel 3.2.1 vorgenommen.

Für die Vorversuche und die Darbietung der Proben an die Geruchsprüfer wurde jeweils derselbe 80 L Beutel verwendet.

4.19.2 Beschreibung des Prüferkollektivs

Die Überprüfung zur Erfüllung der in der DIN EN13725 festgelegten Anforderungen zur Bewertung von n-Butanol wurde vor der Probenbewertung durchgeführt. Individuelle Ergebnisse der einzelnen Prüfer sind in Tabelle 107 dargestellt.

Tabelle 107: Caprolactam – Prüferüberprüfung nach DIN EN 13725

Anforderungen für die Bewertung von n-Butanol $20 \leq 10^{\bar{y}_{ITE}} \leq 80$ und $10^{s_{ITE}} \leq 2,3$

Team	Prüfer	individuelle Empfindlichkeit $10^{\bar{y}_{ITE}}$ in ppb	individuelle maximale Streuung / Standardabweichung $10^{s_{ITE}}$ in ppb	Kriterium Empfindlichkeit erfüllt	Kriterium Standardabweichung erfüllt
A	ERF	52,388	1,756	✓	✓
A	GÖR	45,284	1,370	✓	✓
A	MIF	55,619	1,566	✓	✓

Team	Prüfer	individuelle Empfindlichkeit 10^{YTE} in ppb	individuelle maximale Streuung / Standardabweichung 10^{SITE} in ppb	Kriterium Empfindlichkeit erfüllt	Kriterium Standardabweichung erfüllt
A	MOF	51,623	1,937	✓	✓
B	DÖM	77,466	1,521	✓	✓
B	KOR	31,816	1,616	✓	✓
B	SCS	63,661	1,642	✓	✓
B	STB	40,838	1,441	✓	✓
C	BEA	37,168	1,761	✓	✓
C	GRC	39,652	1,867	✓	✓
C	NAA	73,144	1,808	✓	✓
C	SCL	60,026	1,529	✓	✓

Die Ergebnisse der drei Teams sind in Tabelle 108 zusammengestellt.

Tabelle 108: Caprolactam – Geruchsempfindlichkeit der Teams auf n-Butanol nach DIN EN 13725

Datum	Team	Empfindlichkeit in ppb	Präzision $r \leq 0,477$	Genauigkeit $A \leq 0,217$	Messleiter	Prüfer 1	Prüfer 2	Prüfer 3	Prüfer 4
27.08.2019	A	59,90	0,3804	0,1324	BRL2	ERF	GÖR	MIF	MOF
28.08.2019	B	44,72	0,3681	0,1223	BEA	DÖM	KOR	SCS	STB
29.08.2019	C	84,42	0,4064	0,1409	BRL2	BEA	GRC	NAA	SCL

Sowohl alle Prüfer, als auch das gesamte Team, erfüllen damit die Anforderungen nach DIN EN 13725.

4.19.3 Geruchsstoffkonzentration

Für die Bestimmung der Geruchsstoffkonzentration wurden 12 Prüfer eingesetzt, die jeweils 10 gültige Schwellenschätzungen zur Bestimmung der Geruchsstoffkonzentration abgeben mussten. Diese 10 Schwellenschätzungen wurden auf jeweils drei Messungen aufgeteilt (vgl. Kapitel 3.2.4.1), sodass sich mit drei Teams insgesamt neun Messungen ergeben. Jede Messung erfüllte die normativen Anforderungen und wies ein $\Delta Z \leq 5$ auf.

Die ermittelten Geruchsstoffkonzentrationen für Caprolactam sind in der folgenden Tabelle 109 zusammengestellt. Die mittlere Geruchsstoffkonzentration der drei Teams liegt bei $61 \text{ GE}_E/\text{m}^3$.

Tabelle 109: Caprolactam – Geruchsstoffkonzentration nach DIN EN 13725

Einzeldaten für jeden Prüfer und Durchgang, aufgeteilt auf jeweils drei Messungen unter Angabe des geometrischen Gesamtmittelwertes und des oberen und unteren Wertes in Abhängigkeit des 95% Konfidenzintervalls

Prüfer- kürzel / Durch- gang	Geruchsstoffkonzentration in GE _E /m ³											
	MIF	ERF	GÖR	MOF	STB	DöM	SCS	KOR	BEA	SCL	NAA	GRC
	Team A Messung 1				Team B Messung 1				Team C Messung 1			
1	94	186	94	94	13	94	94	186	356	186	186	94
2	94	94	186	94	25	48	94	48	48	94	186	48
3	186	94	94	48	13	94	48	25	94	94	356	25
	Team A Messung 2				Team B Messung 2				Team C Messung 2			
4	94	94	186	25	13	48	94	25	94	48	186	25
5	94	48	94	48	13	48	48	48	94	48	94	48
6	94	94	48	48	13	25	94	48	48	94	94	48
7	94	94	94	48	13	48	25	94	94	48	94	25
	Team A Messung 3				Team B Messung 3				Team C Messung 3			
8	48	94	94	25	25	48	94	94	94	94	186	48
9	48	48	48	25	25	94	48	48	48	48	94	48
10	48	25	25	25	25	48	94	94	25	94	94	48
Gesamtmittelwert (geometrisch)												61
95% Konfidenzintervall unterer Wert												47
95% Konfidenzintervall oberer Wert												79

Die Bewertungen der Geruchsstoffkonzentration sind sowohl innerhalb der Teams als auch teamübergreifend homogen.

4.19.4 Intensitäten und Weber-Fechner-Koeffizient

Aus den Einzelbewertungen der eingesetzten Prüfer (siehe Anhang A.1.18) ergibt sich durch die Datenaufbereitung entsprechend Kapitel 3.1.2 die Häufigkeit der Intensitätsüberschreitung bezüglich der zugehörigen logarithmierten Verdünnungszahlen wie in Tabelle 110 dargestellt.

Tabelle 110: Caprolactam – Zuordnung der Häufigkeiten der Intensitätsüberschreitungen zu den vorgegebenen Logarithmen der Verdünnungszahlen

log Z / Häufigkeit	2,7	2,4	2,1	1,8	1,5	1,3	1,0	0,7
$H(I > 0)$	0,25	0,11	0,72	0,97	0,97	1,00	1,00	1,00
$H(I > 1)$	0,00	0,00	0,11	0,47	0,89	0,97	1,00	1,00
$H(I > 2)$	0,00	0,00	0,00	0,08	0,36	0,89	0,97	1,00
$H(I > 3)$	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,50	0,86	1,00
$H(I > 4)$	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,47	0,83
$H(I > 5)$	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,06	0,31

Durch Auftragung der Intensitätshäufigkeiten über die logarithmierten Verdünnungszahlen ergeben sich für $H(I > 0)$ bis $H(I > 4)$ fünf einzelne Diagramme, aus denen sich die 16-, 50- und 84-Perzentile $\hat{Z}_{16}$, $\hat{Z}_{50}$ und $\hat{Z}_{84}$ graphisch ableiten lassen (siehe Tabelle 111).

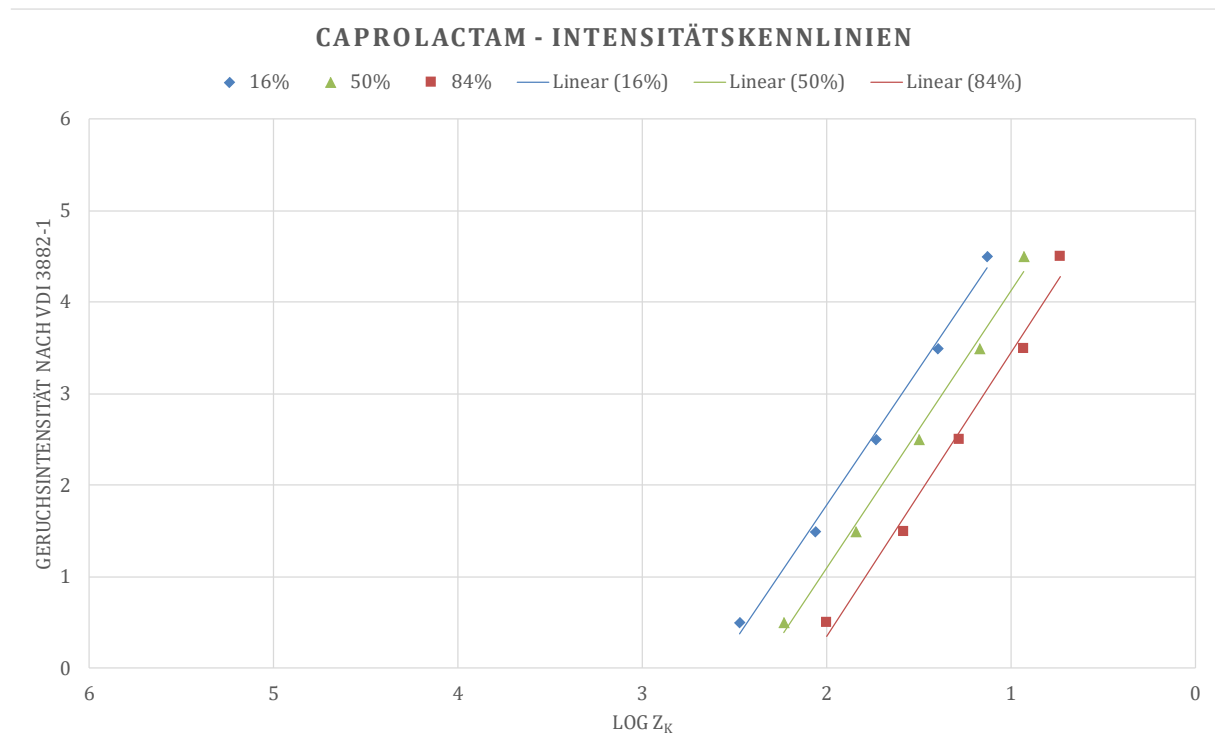
Tabelle 111: Caprolactam – Kenngrößen der Intensitätsstufen I_s

Graphisch ermittelt aus der Auftragung der Häufigkeiten der Intensitätsüberschreitung über die logarithmierten Verdünnungsstufen

I_s	$I = I_s + 0,5$	log Z_{16}	log Z_{50}	log Z_{84}
0	0,5	2,47	2,23	2,00
1	1,5	2,06	1,84	1,58
2	2,5	1,73	1,50	1,28
3	3,5	1,40	1,17	0,93
4	4,5	1,13	0,93	0,73

Durch Auftragung der Daten aus Tabelle 111 ergibt sich die folgende Abbildung 39.

Abbildung 39: Caprolactam – Intensitätskennlinie für $\hat{Z}_{16}$, $\hat{Z}_{50}$ und $\hat{Z}_{84}$ nach 3882-1



Quelle: eigene Darstellung Olfasense GmbH

Die Parameter, die sich für diese Kennlinien ergeben sind in der folgenden Tabelle 112 zusammengestellt.

Tabelle 112: Caprolactam – Parameter der Geradengleichungen der 16-, 50- und 84-Perzentile

Angabe der Korrelationskoeffizienten R, der Bestimmtheitsmaße R² sowie der Steigung b und des Achsenabschnittes a

Parameter	Formelzeichen	◆ 16%	▲ 50%	■ 84%
Korrelationskoeffizient	R	-0,997	-0,997	-0,994
Bestimmtheitsmaß	R ²	0,995	0,993	0,987
Steigung	b	-2,98	-3,04	-3,10
Achsenabschnitt	a	7,74	7,16	6,54

Aus dieser Darstellung lässt sich der Weber-Fechner-Koeffizient mit $k_w = 3,04$ ableiten, sodass sich gemäß Formel (5) in Kapitel 3.1.2 der folgende Zusammenhang für Caprolactam ergibt:

$$I = 3,04 \cdot \log\left(\frac{c_R}{c_{GS}}\right) \quad (27)$$

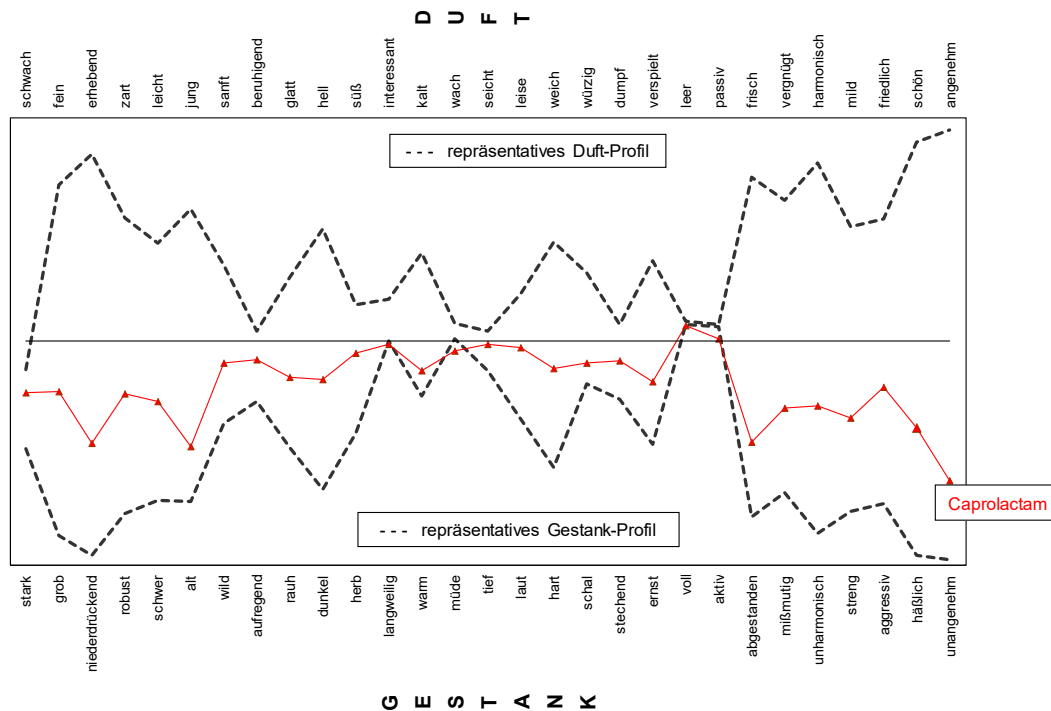
mit:

- I Intensität
- k_W Weber-Fechner-Koeffizient
- c_R Substanzkonzentration in der Riechprobe
- c_{GS} Substanzkonzentration an der Geruchsschwelle

4.19.5 Hedonische Geruchswirkung

Die hedonische Wirkung von Caprolactam ist in Abbildung 40 zusammen mit den repräsentativen Profilen für Duft und Gestank [VDI 3940-4] aufgetragen. Die Bewertung des Caprolactams wurde im Anschluss an die zweite Intensitätsbewertung (Punkt 9 Kapitel 3.2.4.1) vorgenommen, sodass den Prüfern der Geruch gegenwärtig war.

Abbildung 40: Caprolactam – Polaritätenprofil für Caprolactam, Duft und Gestank



repräsentative Profile für Duft und Gestank entsprechend der Daten aus VDI 3940-4

Quelle: Darstellung aus VDI 3940-4; ergänzt um substanzspezifische Daten

Der Produkt-Moment-Korrelationskoeffizient nach Pearson für das Konzept Duft ergibt sich zu -0,82. Für die Korrelation mit dem Konzept Gestank ergibt sich ein Wert von +0,87.

4.19.6 Geruchsscharakter

Für die Bewertung des Geruchsscharakters wurde Caprolactam mit einer Verdünnung von 1:4,8 in einen Nalophan®-Beutel überführt und von 5 Prüfern anhand des Charakters bewertet.

Alle 5 Prüfer assoziierten die Geruchsprobe mit „Schwimmbad“ oder beschrieben den Geruch als „chlorig“. Weitere Beschreibungen waren „muffig“, „käsig“ und „säuerlich“.

4.20 Phenol

4.20.1 Probenaufbereitung

Die Probenaufbereitung wurde entsprechend der folgenden Parameter durchgeführt:

Beutelvolumen:	10 L
Vorbefüllung Probenbeutel:	1 L
Verdampfungstemperatur LiGaVa:	190°C
Substanzmenge injiziert:	10 µL
Flowrate nach Injektion:	1 L/min
Reinheit Substanz:	99%
Dichte Substanz:	1,07 g/cm ³
Aggregatzustand:	fest
Lösungsmittel:	Wasser
Gelöste Substanzmenge:	88 mg
Volumen Lösungsmittel:	5 ml

resultierende rechnerische Konzentration im Mutterbeutel: $17,42 \text{ mg/m}^3$

Die Berechnung der Substanzkonzentration wurde entsprechend der Formeln (6) und (7) aus Kapitel 3.2.1 vorgenommen.

Für die Vorversuche und die Darbietung der Proben an die Geruchsprüfer wurde jeweils der selbe 60 L Beutel verwendet.

4.20.2 Beschreibung des Prüferkollektivs

Die Überprüfung zur Erfüllung der in der DIN EN13725 festgelegten Anforderungen zur Bewertung von n-Butanol wurde vor der Probenbewertung durchgeführt. Individuelle Ergebnisse der einzelnen Prüfer sind in Tabelle 113 dargestellt.

Tabelle 113: Phenol – Prüferüberprüfung nach DIN EN 13725

Anforderungen für die Bewertung von n-Butanol $20 \leq 10^{\bar{y}_{ITE}} \leq 80$ und $10^{s_{ITE}} \leq 2,3$

Team	Prüfer	individuelle Empfindlichkeit $10^{\bar{y}_{ITE}}$ in ppb	individuelle maximale Streuung / Standard-abweichung $10^{s_{ITE}}$ in ppb	Kriterium Empfindlichkeit erfüllt	Kriterium Standard-abweichung erfüllt
A	ADM	59,966	1,500	✓	✓
A	ADS	37,679	1,438	✓	✓
A	KOI	69,749	1,502	✓	✓

Team	Prüfer	individuelle Empfindlichkeit 10^{YTE} in ppb	individuelle maximale Streuung / Standardabweichung 10^{SITE} in ppb	Kriterium Empfindlichkeit erfüllt	Kriterium Standardabweichung erfüllt
A	MOF	54,139	1,756	✓	✓
B	ERF	54,258	1,770	✓	✓
B	KOR	31,816	1,616	✓	✓
B	MEC	35,790	1,555	✓	✓
B	STB	36,716	1,552	✓	✓
C	GAL	27,099	1,451	✓	✓
C	SCL	62,072	1,526	✓	✓
C	SCO	53,342	1,506	✓	✓
C	SÜM	50,593	1,665	✓	✓

Die Ergebnisse der drei Teams sind in Tabelle 114 zusammengestellt.

Tabelle 114: Phenol – Geruchsempfindlichkeit der Teams auf n-Butanol nach DIN EN 13725

Datum	Team	Empfindlichkeit in ppb	Präzision $r \leq 0,477$	Genauigkeit $A \leq 0,217$	Messleiter	Prüfer 1	Prüfer 2	Prüfer 3	Prüfer 4
10.09.2019	A	50,26	0,3976	0,1344	BRL2	ADM	ADS	KOI	MOF
11.09.2019	B	31,41	0,3920	0,1348	BRL2	ERF	KOR	MEC	STB
19.09.2019	C	47,41	0,3775	0,1402	BRL2	GAL	SCL	SCO	SÜM

Sowohl alle Prüfer, als auch das gesamte Team, erfüllen damit die Anforderungen nach DIN EN 13725.

4.20.3 Geruchsstoffkonzentration

Für die Bestimmung der Geruchsstoffkonzentration wurden 12 Prüfer eingesetzt, die jeweils 10 gültige Schwellenschätzungen zur Bestimmung der Geruchsstoffkonzentration abgeben mussten. Diese 10 Schwellenschätzungen wurden auf jeweils drei Messungen aufgeteilt (vgl. Kapitel 3.2.4.1), sodass sich mit drei Teams insgesamt neun Messungen ergeben. Jede Messung erfüllte die normativen Anforderungen und wies ein $\Delta Z \leq 5$ auf.

Die ermittelten Geruchsstoffkonzentrationen für Phenol sind in der folgenden Tabelle 115 zusammengestellt. Die mittlere Geruchsstoffkonzentration der drei Teams liegt bei $360 \text{ GE}_E/\text{m}^3$.

Tabelle 115: Phenol – Geruchsstoffkonzentration nach DIN EN 13725

Einzeldaten für jeden Prüfer und Durchgang, aufgeteilt auf jeweils drei Messungen unter Angabe des geometrischen Gesamtmittelwertes und des oberen und unteren Wertes in Abhängigkeit des 95% Konfidenzintervalls

Prüfer- kürzel / Durch- gang	Geruchsstoffkonzentration in GE _E /m ³											
	MOF	KOI	ADM	ADS	STB	ERF	MEC	KOR	SüM	SCL	SCO	GAL
	Team A Messung 1				Team B Messung 1				Team C Messung 1			
1	1425	356	707	356	356	1425	356	707	707	356	707	356
2	707	356	707	707	356	1425	707	356	707	356	707	356
3	707	356	356	707	707	1425	356	186	94	186	356	186
	Team A Messung 2				Team B Messung 2				Team C Messung 2			
4	1425	707	707	356	356	1425	356	707	186	186	356	186
5	707	356	707	94	356	707	356	186	186	186	356	186
6	707	356	186	356	186	356	356	707	356	356	186	186
7	356	186	707	707	186	356	356	707	356	186	356	186
	Team A Messung 3				Team B Messung 3				Team C Messung 3			
8	707	356	186	356	356	1425	356	707	186	94	186	186
9	356	186	356	356	356	707	356	707	94	186	186	94
10	186	186	356	356	186	356	356	707	186	186	186	94
Gesamtmittelwert (geometrisch)												360
95% Konfidenzintervall unterer Wert												276
95% Konfidenzintervall oberer Wert												469

Die Bewertungen der Geruchsstoffkonzentration sind sowohl innerhalb der Teams als auch teamübergreifend homogen.

4.20.4 Intensitäten und Weber-Fechner-Koeffizient

Aus den Einzelbewertungen der eingesetzten Prüfer (siehe Anhang A.1.19) ergibt sich durch die Datenaufbereitung entsprechend Kapitel 3.1.2 die Häufigkeit der Intensitätsüberschreitung bezüglich der zugehörigen logarithmierten Verdünnungszahlen wie in Tabelle 116 dargestellt.

Tabelle 116: Phenol – Zuordnung der Häufigkeiten der Intensitätsüberschreitungen zu den vorgegebenen Logarithmen der Verdünnungszahlen

log Z / Häufigkeit	3,3	3,0	2,7	2,4	2,1	1,8	1,5	1,3	1,0
$H(I > 0)$	0,03	0,17	0,28	0,75	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00
$H(I > 1)$	0,00	0,00	0,03	0,22	0,86	1,00	1,00	1,00	1,00
$H(I > 2)$	0,00	0,00	0,00	0,06	0,47	0,92	1,00	1,00	1,00
$H(I > 3)$	0,00	0,00	0,00	0,00	0,08	0,33	0,83	0,97	1,00
$H(I > 4)$	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,08	0,31	0,81	0,97
$H(I > 5)$	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,06	0,25	0,44

Durch Auftragung der Intensitätshäufigkeiten über die logarithmierten Verdünnungszahlen ergeben sich für $H(I > 0)$ bis $H(I > 4)$ fünf einzelne Diagramme, aus denen sich die 16-, 50- und 84-Perzentile $\hat{Z}_{16}$, $\hat{Z}_{50}$ und $\hat{Z}_{84}$ graphisch ableiten lassen (siehe Tabelle 117).

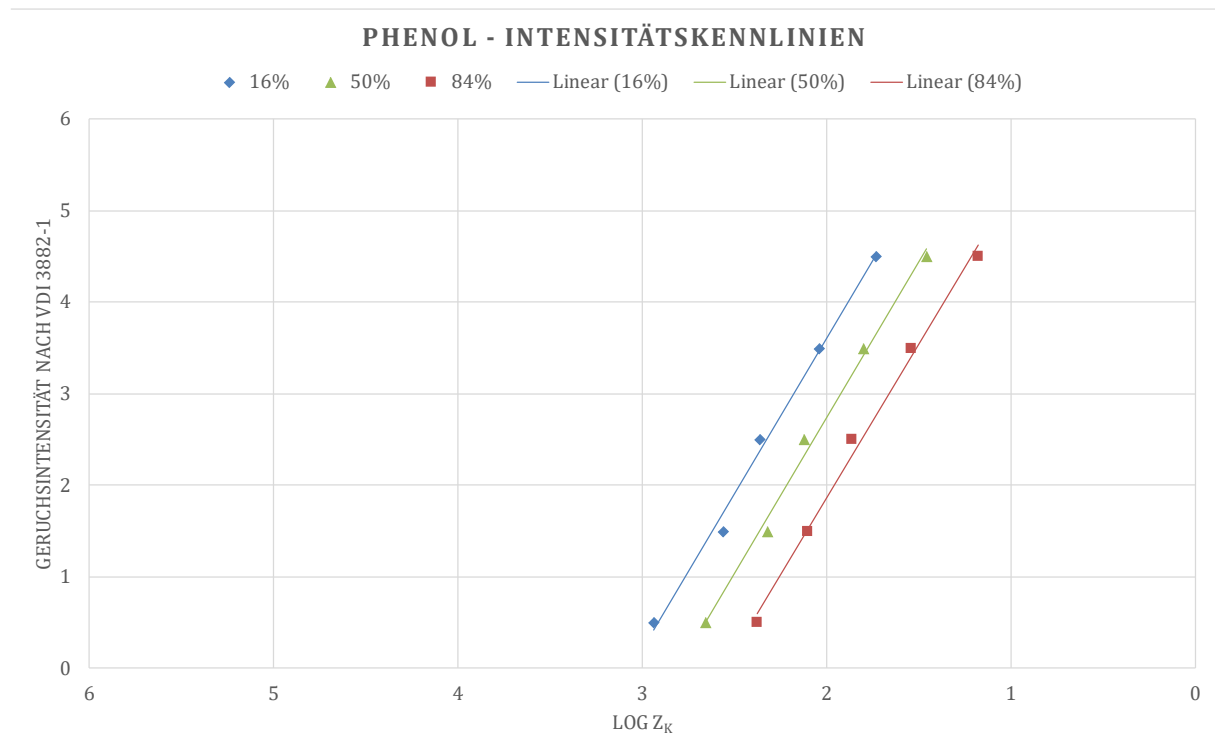
Tabelle 117: Phenol – Kenngrößen der Intensitätsstufen I_s

Graphisch ermittelt aus der Auftragung der Häufigkeiten der Intensitätsüberschreitung über die logarithmierten Verdünnungsstufen

I_s	$I = I_s + 0,5$	log Z_{16}	log Z_{50}	log Z_{84}
0	0,5	2,94	2,66	2,38
1	1,5	2,56	2,32	2,10
2	2,5	2,36	2,12	1,86
3	3,5	2,04	1,80	1,54
4	4,5	1,73	1,46	1,18

Durch Auftragung der Daten aus Tabelle 117 ergibt sich die folgende Abbildung 41.

Abbildung 41: Phenol – Intensitätskennlinien für $\hat{Z}_{16}$, $\hat{Z}_{50}$ und $\hat{Z}_{84}$ nach VDI 3882-1



Quelle: eigene Darstellung Olfasense GmbH

Die Parameter, die sich für diese Kennlinien ergeben sind in der folgenden Tabelle 118 zusammengestellt.

Tabelle 118: Phenol – Parameter der Geradengleichungen der 16-, 50- und 84-Perzentile

Angabe der Korrelationskoeffizienten R, der Bestimmtheitsmaße R^2 sowie der Steigung b und des Achsenabschnittes a

Parameter	Formelzeichen	◆ 16%	▲ 50%	■ 84%
Korrelationskoeffizient	R	-0,997	-0,997	-0,997
Bestimmtheitsmaß	R^2	0,994	0,994	0,994
Steigung	b	-3,38	-3,40	-3,36
Achsenabschnitt	a	10,36	9,55	8,59

Aus dieser Darstellung lässt sich der Weber-Fechner-Koeffizient mit $k_w = 3,40$ ableiten, sodass sich gemäß Formel (5) in Kapitel 3.1.2 der folgende Zusammenhang für Phenol ergibt:

$$I = 3,40 \cdot \log\left(\frac{c_R}{c_{GS}}\right) \quad (28)$$

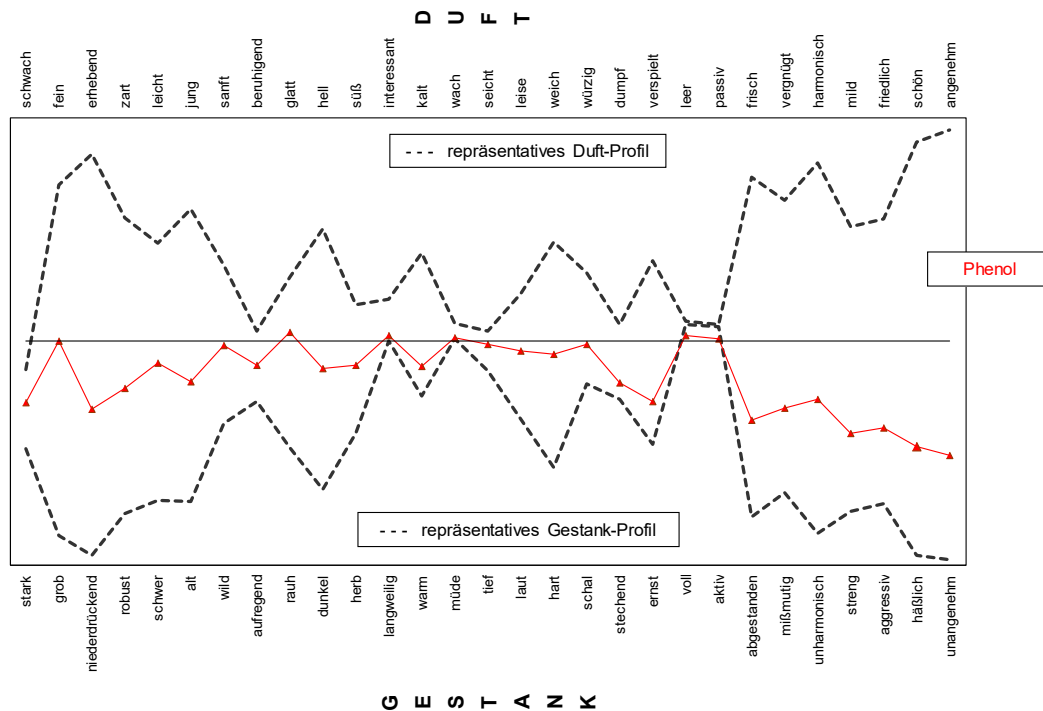
mit:

- I Intensität
- k_W Weber-Fechner-Koeffizient
- c_R Substanzkonzentration in der Riechprobe
- c_{GS} Substanzkonzentration an der Geruchsschwelle

4.20.5 Hedonische Geruchswirkung

Die hedonische Wirkung von Phenol ist in Abbildung 42 zusammen mit den repräsentativen Profilen für Duft und Gestank [VDI 3940-4] aufgetragen. Die Bewertung des Phenols wurde im Anschluss an die zweite Intensitätsbewertung (Punkt 9 Kapitel 3.2.4.1) vorgenommen, sodass den Prüfern der Geruch gegenwärtig war.

Abbildung 42: Phenol – Polaritätenprofil für Phenol, Duft und Gestank



repräsentative Profile für Duft und Gestank entsprechend der Daten aus VDI 3940-4

Quelle: Darstellung aus VDI 3940-4; ergänzt um substanzspezifische Daten

Der Produkt-Moment-Korrelationskoeffizient nach Pearson für das Konzept Duft ergibt sich zu -0,64. Für die Korrelation mit dem Konzept Gestank ergibt sich ein Wert von +0,73.

4.20.6 Geruchscharakter

Für die Bewertung des Geruchscharakters wurde Phenol mit einer Verdünnung von 1:17,9 in einen Nalophan®-Beutel überführt und von 5 Prüfern anhand des Charakters bewertet.

Alle 5 Prüfer empfanden den Geruch als „chemisch“. Drei der Prüfer beschrieben ihn als „phenolisch“, „medizinisch“ und nach „Lösungsmittel“ riechend. Weiterhin wurde der Geruch als „stechend“ wahrgenommen.

4.21 2-Butanonoxim

4.21.1 Probenaufbereitung

Die Probenaufbereitung wurde entsprechend der folgenden Parameter durchgeführt:

Beutelvolumen:	80 L
Vorbefüllung Probenbeutel:	8 L
Verdampfungstemperatur LiGaVa:	160°C
Substanzmenge injiziert:	0,5 µL
Flowrate nach Injektion:	1 L/min
Reinheit Substanz:	99%
Dichte Substanz:	0,92 g/cm ³
Aggregatzustand:	flüssig

resultierende rechnerische Konzentration im Mutterbeutel: 5,69 mg/m³

Die Berechnung der Substanzkonzentration wurde entsprechend der Formeln (6) und (7) aus Kapitel 3.2.1 vorgenommen.

Für die Vorversuche und die Darbietung der Proben an die Geruchsprüfer wurde jeweils derselbe 80 L Beutel verwendet.

4.21.2 Beschreibung des Prüferkollektivs

Die Überprüfung zur Erfüllung der in der DIN EN13725 festgelegten Anforderungen zur Bewertung von n-Butanol wurde vor der Probenbewertung durchgeführt. Individuelle Ergebnisse der einzelnen Prüfer sind in Tabelle 119 dargestellt.

Tabelle 119: 2-Butanonoxim – Prüferüberprüfung nach DIN EN 13725

Anforderungen für die Bewertung von n-Butanol $20 \leq 10^{\bar{y}_{ITE}} \leq 80$ und $10^{s_{ITE}} \leq 2,3$

Team	Prüfer	individuelle Empfindlichkeit $10^{\bar{y}_{ITE}}$ in ppb	individuelle maximale Streuung / Standard-abweichung $10^{s_{ITE}}$ in ppb	Kriterium Empfindlichkeit erfüllt	Kriterium Standard-abweichung erfüllt
A	DOA	30,007	1,584	✓	✓
A	ERF	62,455	1,701	✓	✓
A	GAL	31,544	1,658	✓	✓
A	SÜM	56,928	2,034	✓	✓
B	GÖR	40,764	1,529	✓	✓
B	SCO	46,238	1,495	✓	✓

Team	Prüfer	individuelle Empfindlichkeit 10^{YTE} in ppb	individuelle maximale Streuung / Standard-abweichung 10^{SITE} in ppb	Kriterium Empfindlichkeit erfüllt	Kriterium Standard-abweichung erfüllt
B	SHC	26,548	1,345	✓	✓
B	SHD	31,398	1,390	✓	✓
C	KEH	49,273	1,581	✓	✓
C	MIF	41,083	1,457	✓	✓
C	PEC	48,664	1,512	✓	✓
C	STB	34,202	1,599	✓	✓

Die Ergebnisse der drei Teams sind in Tabelle 120 zusammengestellt.

Tabelle 120: 2-Butanonoxim – Geruchsempfindlichkeit der Teams auf n-Butanol nach DIN EN 13725

Datum	Team	Empfindlichkeit in ppb	Präzision $r \leq 0,477$	Genauigkeit $A \leq 0,217$	Mess-leiter	Prüfer 1	Prüfer 2	Prüfer 3	Prüfer 4
24.09.2019	A	75,54	0,3953	0,1450	BRL2	DOA	ERF	GAL	SÜM
25.09.2019	B	31,47	0,4134	0,1372	BEA	GÖR	SCO	SHC	SHD
26.09.2019	C	33,32	0,4183	0,1252	BEA	KEH	MIF	PEC	STB

Sowohl alle Prüfer, als auch das gesamte Team, erfüllen damit die Anforderungen nach DIN EN 13725.

4.21.3 Geruchsstoffkonzentration

Für die Bestimmung der Geruchsstoffkonzentration wurden 12 Prüfer eingesetzt, die jeweils 10 gültige Schwellenschätzungen zur Bestimmung der Geruchsstoffkonzentration abgeben mussten. Diese 10 Schwellenschätzungen wurden auf jeweils drei Messungen aufgeteilt (vgl. Kapitel 3.2.4.1), sodass sich mit drei Teams insgesamt neun Messungen ergeben. Jede Messung erfüllte die normativen Anforderungen und wies ein $\Delta Z \leq 5$ auf.

Die ermittelten Geruchsstoffkonzentrationen für 2-Butanonoxim sind in der folgenden Tabelle 121 zusammengestellt. Die mittlere Geruchsstoffkonzentration der drei Teams liegt bei $21 \text{ GE}_E/\text{m}^3$.

Tabelle 121: 2-Butanonoxim – Geruchsstoffkonzentration nach DIN EN 13725

Einzeldaten für jeden Prüfer und Durchgang, aufgeteilt auf jeweils drei Messungen unter Angabe des geometrischen Gesamtmittelwertes und des oberen und unteren Wertes in Abhängigkeit des 95% Konfidenzintervalls

Prüfer- kürzel / Durch- gang	Geruchsstoffkonzentration in GE _E /m ³											
	SÜM	ERF	DOA	GAL	SHC	SHD	SCO	GÖR	STB	KEH	MIF	PEC
	Team A Messung 1				Team B Messung 1				Team C Messung 1			
1	25	48	94	48	13	13	48	48	25	13	25	25
2	13	25	25	13	13	13	13	25	13	25	25	25
3	13	25	25	13	13	13	25	25	13	13	25	13
	Team A Messung 2				Team B Messung 2				Team C Messung 2			
4	13	25	48	13	25	13	25	48	13	13	25	13
5	13	13	25	25	13	25	13	48	25	25	25	25
6	48	48	48	25	13	13	25	48	13	25	25	25
7	25	25	48	25	25	25	13	48	25	13	48	25
	Team A Messung 3				Team B Messung 3				Team C Messung 3			
8	25	13	25	48	13	13	25	48	13	25	48	13
9	13	13	25	25	13	13	13	25	13	13	25	25
10	25	13	25	13	13	13	13	13	13	13	25	13
Gesamtmittelwert (geometrisch)												21
95% Konfidenzintervall unterer Wert												16
95% Konfidenzintervall oberer Wert												27

Die Bewertungen der Geruchsstoffkonzentration sind sowohl innerhalb der Teams als auch teamübergreifend homogen.

4.21.4 Intensitäten und Weber-Fechner-Koeffizient

Aus den Einzelbewertungen der eingesetzten Prüfer (siehe Anhang A.1.20) ergibt sich durch die Datenaufbereitung entsprechend Kapitel 3.1.2 die Häufigkeit der Intensitätsüberschreitung bezüglich der zugehörigen logarithmierten Verdünnungszahlen wie in Tabelle 122 dargestellt. Aufgrund der Gefährlichkeit des 2-Butanonoxims wurde die Konzentration im Mutterbeutel rechnerisch verhältnismäßig gering gewählt, sodass nicht 6, sondern nur 4 überschwellige Intensitätsstufen dargeboten werden konnten. Dies wirkt sich direkt auf die Kenngrößen der Intensitätsstufen (vgl. Tabelle 123) aus, die für $I_s = 4$ nicht abgeleitet werden konnten, sodass auch die Intensitätskennlinien (vgl. Abbildung 43) jeweils mit nur 4 charakteristischen Punkten aufgezeichnet sind.

Tabelle 122: 2-Butanonoxim – Zuordnung der Häufigkeiten der Intensitätsüberschreitungen zu den vorgegebenen Logarithmen der Verdünnungszahlen

log Z / Häufigkeit	2,1	1,8	1,5	1,3	1,0	0,7
$H(I>0)$	0,17	0,17	0,50	0,89	0,97	1,00
$H(I>1)$	0,00	0,03	0,03	0,47	0,67	1,00
$H(I>2)$	0,00	0,00	0,00	0,19	0,28	0,78
$H(I>3)$	0,00	0,00	0,00	0,00	0,03	0,44
$H(I>4)$	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,14
$H(I>5)$	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,03

Durch Auftragung der Intensitätshäufigkeiten über die logarithmierten Verdünnungszahlen ergeben sich für $H(I>0)$ bis $H(I>4)$ fünf einzelne Diagramme, aus denen sich die 16-, 50- und 84-Perzentile $\hat{Z}_{16}$, $\hat{Z}_{50}$ und $\hat{Z}_{84}$ graphisch ableiten lassen (siehe Tabelle 123).

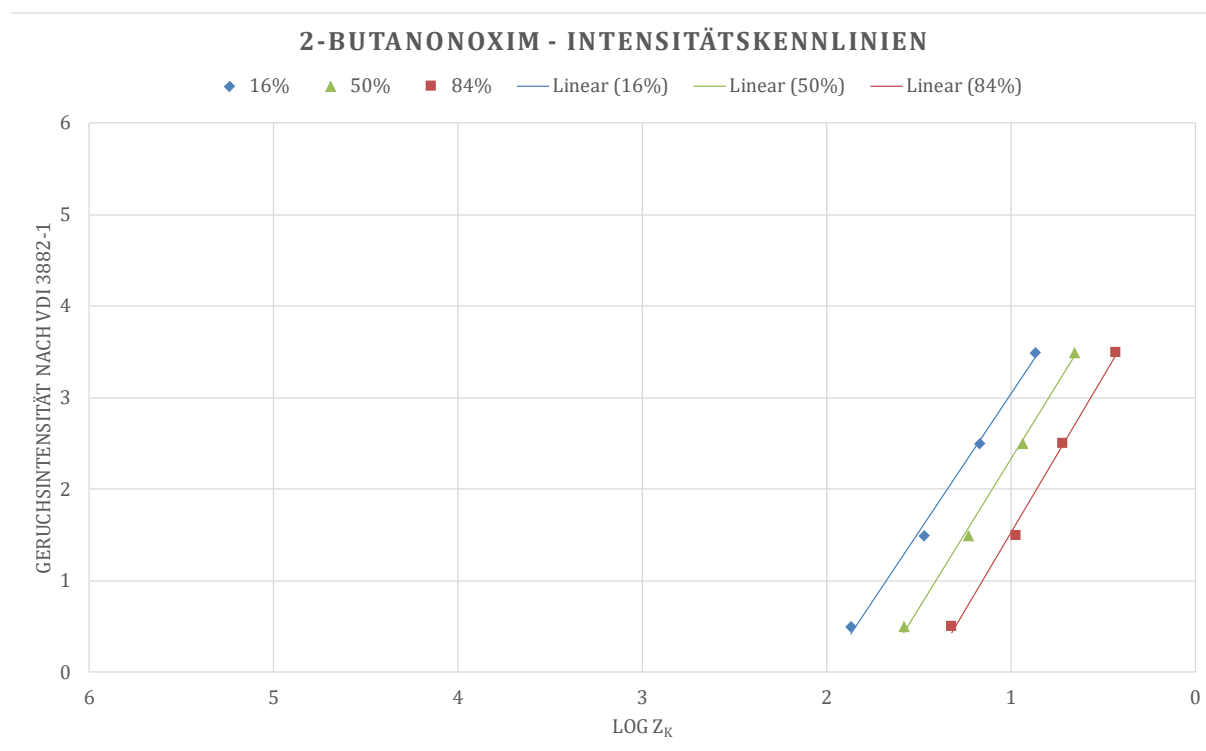
Tabelle 123: 2-Butanonoxim – Kenngrößen der Intensitätsstufen I_s

Graphisch ermittelt aus der Auftragung der Häufigkeiten der Intensitätsüberschreitung über die logarithmierten Verdünnungsstufen

I_s	$I = I_s + 0,5$	log Z_{16}	log Z_{50}	log Z_{84}
0	0,5	1,87	1,58	1,32
1	1,5	1,47	1,23	0,97
2	2,5	1,17	0,94	0,72
3	3,5	0,87	0,66	0,43
4	4,5	-	-	-

Durch Auftragung der Daten aus Tabelle 123 ergibt sich die folgende Abbildung 43.

Abbildung 43: 2-Butanonoxim – Intensitätskennlinie für Ž16, Ž50 und Ž84 nach 3882-1



Quelle: eigene Darstellung Olfasense GmbH

Die Parameter, die sich für diese Kennlinien ergeben sind in der folgenden Tabelle 124 zusammengestellt.

Tabelle 124: 2-Butanonoxim – Parameter der Geradengleichungen der 16-, 50- und 84-Perzentile

Angabe der Korrelationskoeffizienten R, der Bestimmtheitsmaße R² sowie der Steigung b und des Achsenabschnittes a

Parameter	Formelzeichen	◆ 16%	▲ 50%	■ 84%
Korrelationskoeffizient	R	-0,997	-0,999	-0,998
Bestimmtheitsmaß	R ²	0,995	0,997	0,996
Steigung	b	-3,01	-3,27	-3,41
Achsenabschnitt	a	6,05	5,60	4,93

Aus dieser Darstellung lässt sich der Weber-Fechner-Koeffizient mit k_w = 3,27 ableiten, sodass sich gemäß Formel (5) in Kapitel 3.1.2 der folgende Zusammenhang für 2-Butanonoxim ergibt:

$$I = 3,27 \cdot \log\left(\frac{c_R}{c_{GS}}\right) \quad (29)$$

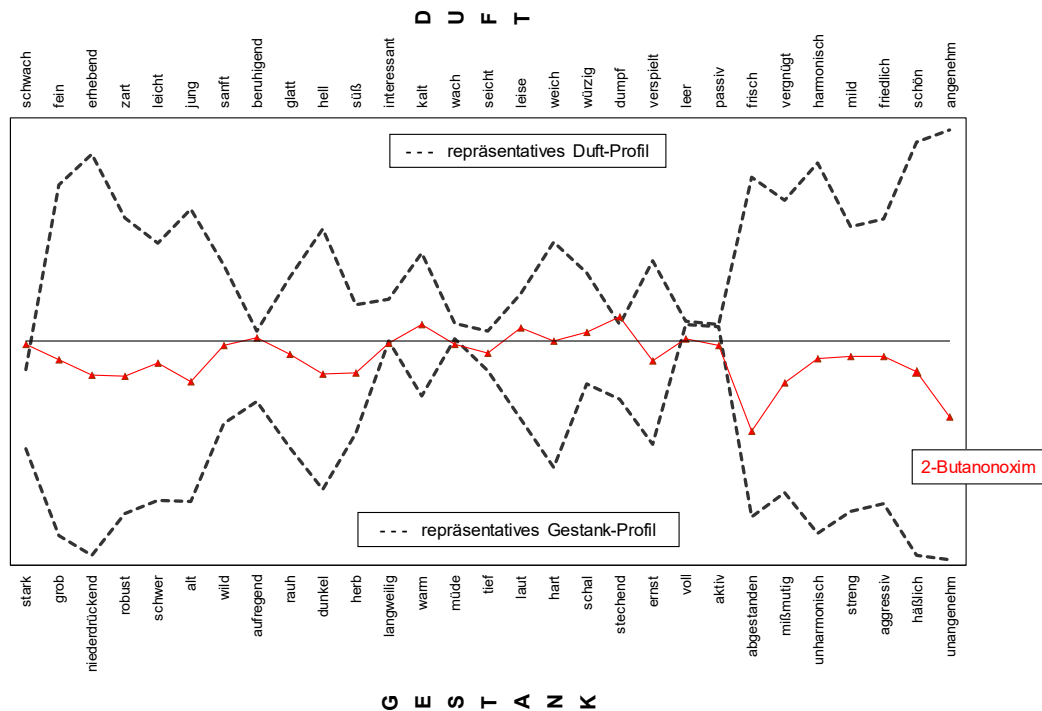
mit:

- I Intensität
- k_W Weber-Fechner-Koeffizient
- c_R Substanzkonzentration in der Riechprobe
- c_{GS} Substanzkonzentration an der Geruchsschwelle

4.21.5 Hedonische Geruchswirkung

Die hedonische Wirkung von 2-Butanonoxim ist in Abbildung 44 zusammen mit den repräsentativen Profilen für Duft und Gestank [VDI 3940-4] aufgetragen. Die Bewertung des 2-Butanonoxims wurde im Anschluss an die zweite Intensitätsbewertung (Punkt 9 Kapitel 3.2.4.1) vorgenommen, sodass den Prüfern der Geruch gegenwärtig war.

Abbildung 44: 2-Butanonoxim – Polaritätenprofil für 2-Butanonoxim, Duft und Gestank



repräsentative Profile für Duft und Gestank entsprechend der Daten aus VDI 3940-4

Quelle: Darstellung aus VDI 3940-4; ergänzt um substanzspezifische Daten

Der Produkt-Moment-Korrelationskoeffizient nach Pearson für das Konzept Duft ergibt sich zu -0,68. Für die Korrelation mit dem Konzept Gestank ergibt sich ein Wert von +0,66.

4.21.6 Geruchsscharakter

Um nicht unnötige viele Prüfer mit 2-Butanonoxim in höherer Konzentration zu belasten, wurde auf die zusätzliche beschreibende Charakterisierung dieser Substanz verzichtet.

5 Analytik

5.1 Allgemeine Messdurchführung und Prüfergebnisse

Zunächst wurden die Substanzen mittels GC-IMS qualitativ auf deren Konstanz über die Dauer der olfaktometrischen Messungen hinweg überprüft. Die analytische Quantifizierung der Substanzen mittels GC-MS wurde während des laufenden Projektes beschlossen, sodass diese, beginnend mit Nonanal, Hexansäure, *p*-Kresol, Naphthalin, 1-Methylnaphthalin und 1,4-Dimethylnaphthalin sowie 2-Ethylhexanol, im Bereich der Geruchsschwelle durchgeführt wurde. Für *p*-Kresol zeigt sich, dass die GC-MS-Werte teils unterhalb der Bestimmungsgrenze lagen und dass die Analyse dieses Stoffes in dem Bereich der Geruchsschwelle damit eine Herausforderung darstellt. Da dies auch bei den anderen Proben teils zu relativ kleinen, gerade noch quantifizierbaren Peaks führte, wurden Probenahmen folgend auch deutlich oberhalb der Geruchsschwelle durchgeführt.

Die Probenahme für GC-IMS wurde grundsätzlich bei Verdünnungen durchgeführt, die zu einer guten Detektion der Probe führten.

Für 2-Phenoxyethanol, Butansäure, Essigsäure, Hexansäure, 2,4,6-Trichloranisol und 2-Butanonoxim konnte keine hinreichende Quantifizierung mittels GC-MS durchgeführt werden, sodass diese Substanzen qualitativ mittels GC-IMS vermessen wurden.

Die Messergebnisse der GC-IMS sind in der folgenden Tabelle 125 aufgeführt. Konnten Dimere für die GC-IMS-Messung identifiziert werden, werden für die entsprechenden Substanzen zwei Peaks aufgeführt. Konnte nur ein Peak zugeordnet werden, wird ein einzelner Peak aufgeführt. Weiterhin werden die GC-IMS-Peaks zusammen mit den zugrundeliegenden Voltzahlen des Detektors in mV angegeben sowie die resultierenden relativen Standardabweichungen der drei Messungen je Substanz.

Tabelle 125: GC-IMS-Messungen mit jeweils einer Messung vor, während und nach der olfaktometrischen Probenbewertung (chronologisch von oben nach unten)

Angabe der Verdünnung des Probenluft im Mutterbeutel für die Probenahme mittels GC-IMS sowie topografische Darstellung der Peaks unter Angabe der korrelierenden Volt-Zahl in mV und der relativen Standardabweichung zwischen den jeweiligen drei Messungen

Substanz	Verdünnung Mutterbeutel bei Probenahme	GC-IMS topografische Darstellung Peak 1	GC-IMS topografische Darstellung Peak 2	relative Standard- abweichung. Peak 1	relative Standard- abweichung. Peak 2
2-Phenoxy- ethanol	1:10,2	819 mV 	63 mV 	2,5%	17,7%
		793 mV 	47 mV 		
		780 mV 	47 mV 		
Butansäure	unverdünnt	725 mV 	2028 mV 	2,4%	6,5%
		703 mV 	1857 mV 		
		691 mV 	1791 mV 		
Essigsäure	1:128	350 mV 	-	10,2%	-
		348 mV 			
		291 mV 			
Hexansäure	1:11	564 mV 	589 mV 	0,5%	14,6%
		560 mV 	479 mV 		
		563 mV 	428 mV 		
2,4,6-Trichlor- anisol	unverdünnt	277 mV 	652 mV 	0,6%	1,9%
		274 mV 	647 mV 		
		276 mV 	671 mV 		
2-Butanonoxim	unverdünnt	396 mV 	1144 mV 	0,6%	0,5%
		399 mV 	1135 mV 		
		401 mV 	1144 mV 		

In der folgenden Tabelle 126 sind alle Einzelsubstanzen unter Angabe der verwendeten Analysenmethode sowie der Kalibrierdaten aus der GC-MS zusammengestellt. Für die Kalibrierung spielen insbesondere der Kalibrierbereich, aber auch die Genauigkeit der Messungen eine grundlegende Rolle. Daher wurde für einzelne Triplikate eine Standardabweichung von $\pm 15\%$ festgelegt. Lag diese bei einzelnen Triplikaten außerhalb dieser $\pm 15\%$, so wurde der offensichtliche Ausreißer aus den Triplikaten entfernt. Einige Kalibrierpunkte sind somit nur durch Duplikate abgesichert. Für Duplikate wird im Folgenden keine Standardabweichung angegeben (vgl. Tabelle 127).

Tabelle 126: Verwendete Analysenmethode je Substanz und Analysen- und Kalibrierdaten der Einzelsubstanzen aus der GC-MS

Angabe der angewendeten Analysenmethode (FID, GC-MS oder GC-IMS) sowie Kalibrierdaten aus der GC-MS (Anzahl Kalibrierpunkte, untere und obere Kalibriergrenze sowie R² der GC-MS Kalibriergerade)

Substanz-Nr.	Substanz	Analysenmethode	Anzahl Kalibrierpunkte	Kalibrierung untere Grenze (Bestimmungsgrenze) [mg/m ³]	Kalibrierung obere Grenze [mg/m ³]	R ² Kalibriergerade
01	Aceton	FID	-	-	-	-
02	2-Ethylhexanol	GC-MS	6	33,2	232	0,9957
03	Acetophenon	GC-MS	6	8	80	0,9861
04	Benzothiazol	GC-MS	6	60	360	0,9985
05	2-Phenoxyethanol	GC-IMS	-	-	-	-
06	Butansäure	GC-IMS	-	-	-	-
07	Essigsäure	GC-IMS	-	-	-	-
08	Hexanal	GC-MS	4	0,49	82	1,0000
09	Nonanal	GC-MS	5	0,25	207	0,9996
10	m-Kresol	GC-MS	4	0,6	103	0,9999
11	Hexansäure	GC-IMS	-	-	-	-
12	p-Kresol	GC-MS	5	0,33	334	0,9991
13	2,4,6-Trichloranisol	GC-IMS	-	-	-	-
14	Naphthalin	GC-MS	5	0,5	25	0,9999
15	1-Methylnaphthalin	GC-MS	5	4	28	0,9927

Substanz-Nr.	Substanz	Analysenmethode	Anzahl Kalibrierpunkte	Kalibrierung untere Grenze (Bestimmungsgrenze) [mg/m³]	Kalibrierung obere Grenze [mg/m³]	R ² Kalibriergerade
16	2-Methylnaphthalin	GC-MS	6	5	60	0,9996
17	1,4-Dimethylnaphthalin	GC-MS	7	9,5	194	0,9965
18	ε-Caprolactam	GC-MS	5	40	200	0,9747
19	Phenol	GC-MS	6	50	400	0,9946
20	2-Butanonoxim	GC-IMS	-	-	-	-

Weiterhin wurden die Signal-zu-Rausch-Verhältnisse jedes Peaks bestimmt. Für die Bestimmungsgrenze musste das Signal-zu-Rauschverhältnis größer 10 sein. Das Verhältnis wurde über die Auswertesoftware ermittelt. Die untere Kalibriergrenze wurde als Bestimmungsgrenze der jeweiligen Substanz festgelegt. Bei den Kalibriergeraden durfte bei Konzentrationen bis zum 3-fachen der Bestimmungsgrenze die Standardabweichung bei $\pm 20\%$ liegen, bei den anderen Konzentrationen der Kalibrierung bei $\pm 15\%$.

Zusätzlich wurde eine Konzentration der Kalibrierung während der Messungen zur internen Qualitätssicherung eingesetzt. Die jeweiligen Konzentrationen lagen stets innerhalb der erlaubten $\pm 15\%$ Wiederfindung.

Lagen einzelne Messwerte sowohl der Kalibrierung als auch der Probenmessung unterhalb der Bestimmungsgrenze oder wiesen ein Signal-Rausch-Verhältnis kleiner als 10 auf, konnten diese nicht hinreichend quantifiziert werden und wurden aus der Betrachtung herausgenommen.

Die Probenahmebedingungen für die Analytik sind in der folgenden Tabelle 127 zusammengestellt. Dazu zählen die Vorverdünnung des Mutterbeutels für die Probenahme, das Probenahmenvolumen für die GC-MS-Analytik sowie die absoluten Massen in ng, die auf den Tenax®-Tubes zur GC-MS-Analyse gesammelt wurden. Die analytisch ermittelten Konzentrationen sind mit Mittelwert, Standardabweichung und relativer Standardabweichung angegeben. Für die GC-IMS-Messungen sind die relativen Standardabweichungen zwischen den jeweils drei Messungen angegeben. Zusätzlich ist die rechnerisch ermittelte Konzentration im Mutterbeutel angegeben.

Tabelle 127: Probenahmebedingungen und Messergebnisse aus FID, GC-MS und GC-IMS-Analysen

Angabe der Vorverdünnung des Mutterbeutels (MB) für die Probenahme. Für GC-MS zusätzlich Angabe des Probenahmevolumens und der ermittelten absoluten Masse in ng auf dem Tenax®-Tube. Für FID und GC-MS Angabe der ermittelten analytischen Konzentration mit zugehöriger (relativer) Standardabweichung. Für GC-IMS Angabe der relativen Standardabweichung zwischen einzelnen Messungen. Vergleichende Angabe analytischer Konzentrationen zur rechnerisch ermittelten Konzentration im Mutterbeutel.

lfd. Nr.	Substanz	Vorverdünnung MB bei Probenahme	Probenahmevolumen in mL (GC-MS)	ng abs. (GC-MS)	Konzentration im MB [mg/m³]	Mittelwert Konzentration im MB [mg/m³]	Standardabweichung [mg/m³]	relative Standardabweichung [%]	rechnerische Konzentration im MB [mg/m³]
01	Aceton	1:247 1:247 1:247 1:968 1:968 1:968	-	-	14096 13941 14019 13871 13780 13689	13899	151	1,1	15029
02	2-Ethylhexanol	1:999 1:999 1:999	1007 1002 1004	68,3 59,4 31,4	91,1 79,7 42,0	70,9	25,7	36,3	92,2
03	Acetophenon	1:1459 1:1459 1:1459	997 997 996	29,5 30,7 18,6	43,2 44,9 27,2	38,4	9,8	25,4	102,8
04	Benzothiazol	1:325 1:325 1:325	1003 1037 1066	108,4 92,4 88,3	35,1 28,9 26,9	30,3	4,3	14,1	47,5
05	2-Phenoxy-ethanol	1:10,2	-	-	-	-	-	2,5 – 17,7	545,5
06	Butansäure	unverdünnt	-	-	-	-	-	2,4 – 6,5	13,48
07	Essigsäure	1:128	-	-	-	-	-	10,2	259,9

lfd. Nr.	Substanz	Vorverdünnung MB bei Probenahme	Probenahme- volumen in mL (GC-MS)	ng abs. (GC-MS)	Konzentration im MB [mg/m³]	Mittelwert Konzentration im MB [mg/m³]	Standard- abweichung [mg/m³]	relative Standard- abweichung [%]	rechnerische Konzentration im MB [mg/m³]
08	Hexanal	1:419	101	3,6	14,7	20,2	4,7	23,5	19,94
		1:419	101	5,5	23,0				
		1:419	100	5,5	22,9				
09	Nonanal	1:3042	1001	3,8	11,4	10,6	0,8	7,2	13,08
		1:3042	1001	3,3	10,0				
		1:3042	999	3,4	10,3				
10	m-Kresol	1:3042	1530	1,1	2,2	2,47	0,3	12,1	2,73
		1:3042	1562	1,4	2,8				
		1:3042	1551	1,3	2,5				
11	Hexansäure	1:11	-	-	-	-	-	0,5 – 14,6	15,05
12	p-Kresol	1:2155	1003	0,477	1,0	0,98	-	-	0,98
		1:2155	1001	0,435	0,9				
13	2,4,6-Trichlor- anisol	unverdünnt	-	-	-	-	-	0,6 – 1,9	2,26
14	Naphthalin	1:2155	5002	3,946	1,7	1,22	0,42	34,7	2,42
		1:2155	4999	2,408	1,0				
		1:2155	5008	2,123	0,9				
15	1-Methyl- naphthalin	1:1055	5270	15,766	3,2	2,62	0,52	19,8	12,92
		1:1055	5439	10,945	2,1				
		1:1055	6277	15,336	2,6				
16	2-Methyl- naphthalin	1:85	999	14,0	1,2	1,14	0,19	17,1	3,98
		1:85	996	10,8	0,9				
		1:85	999	15,3	1,3				
17	1,4-Dimethyl- naphthalin	1:1095	5047	13,139	2,9	2,82	0,36	12,7	24,1
		1:1095	4997	14,440	3,2				

lfd. Nr.	Substanz	Vorverdünnung MB bei Probenahme	Probenahme- volumen in mL (GC-MS)	ng abs. (GC-MS)	Konzentration im MB [mg/m³]	Mittelwert Konzentration im MB [mg/m³]	Standard- abweichung [mg/m³]	relative Standard- abweichung [%]	rechnerische Konzentration im MB [mg/m³]
		1:1095	5028	11,250	2,5				
18	ε-Caprolactam	1:137	1003	151,6	20,7				
		1:137	1002	151,1	20,7	19,38	2,27	11,7	24,35
		1:137	1194	146,1	16,8				
19	Phenol	1:63	1063	81,6	4,8				
		1:63	2182	175,4	5,1	5,11	0,30	5,8	17,42
		1:63	2011	173,1	5,4				
20	2-Butanonoxim	unverdünnt	-	-	-	-	-	0,5 – 0,6	5,69

5.2 Plausibilität und Diskussion

Zur Überprüfung der Plausibilität der rechnerischen Substanzkonzentrationen im Mutterbeutel werden im Folgenden die Übereinstimmungen zwischen rechnerischen und analytischen Konzentrationsdaten überprüft.

Für die rechnerischen Substanzkonzentrationen werden empirisch ermittelte Unsicherheitsbudgets, mit n-Butanol als Referenzsubstanz, zugrunde gelegt. Hierfür wurde n-Butanol in 9-facher Aufbereitung in LiGaVa mittels FID vermessen und daraus die Unsicherheit der Aufbereitung mit 2% ermittelt. Unter Berücksichtigung der Unsicherheit der FID-Analyse von 3,8% entsprechend der Herstellerangaben, ergibt sich durch quadratische Fehleraddition eine Gesamtunsicherheit von 4,3%. Um weitere Einflussparameter an verschiedenen Prüftagen und den Einfluss unterschiedlicher Substanzeigenschaften (beispielsweise Dampfdruck u.a.) mit zu berücksichtigen, wird im Zuge der weiteren Betrachtungen ein Sicherheitsfaktor von 2 einbezogen und damit eine Unsicherheit von 10% für die Substanzaufbereitung im LiGaVa angenommen. Aus rechnerisch ermittelter Konzentration und 10% Unsicherheitsbudget ergibt sich ein theoretischer Konzentrationsbereich im Mutterbeutel. Dieser Bereich ist in Abbildung 45 um die zu 100% normierten rechnerischen Konzentrationen aufgetragen.

Die Unsicherheit der analytischen Substanzkonzentration aus der GC-MS setzt sich aus der Unsicherheit der Probenahmepumpe von 5%, der für dieses Projekt vorgegebenen und tolerierten Unsicherheit der GC-MS-Analyse von 15% und weiterhin aus der normativ zulässigen 20% Unsicherheit aus der Darbietung der Probe am Olfaktometer [DIN EN 13725:2003] zusammen. Durch quadratische Addition ergibt sich daraus für die analytische Konzentration mittels GC-MS ein Gesamtunsicherheitsbudget von 25,5%.

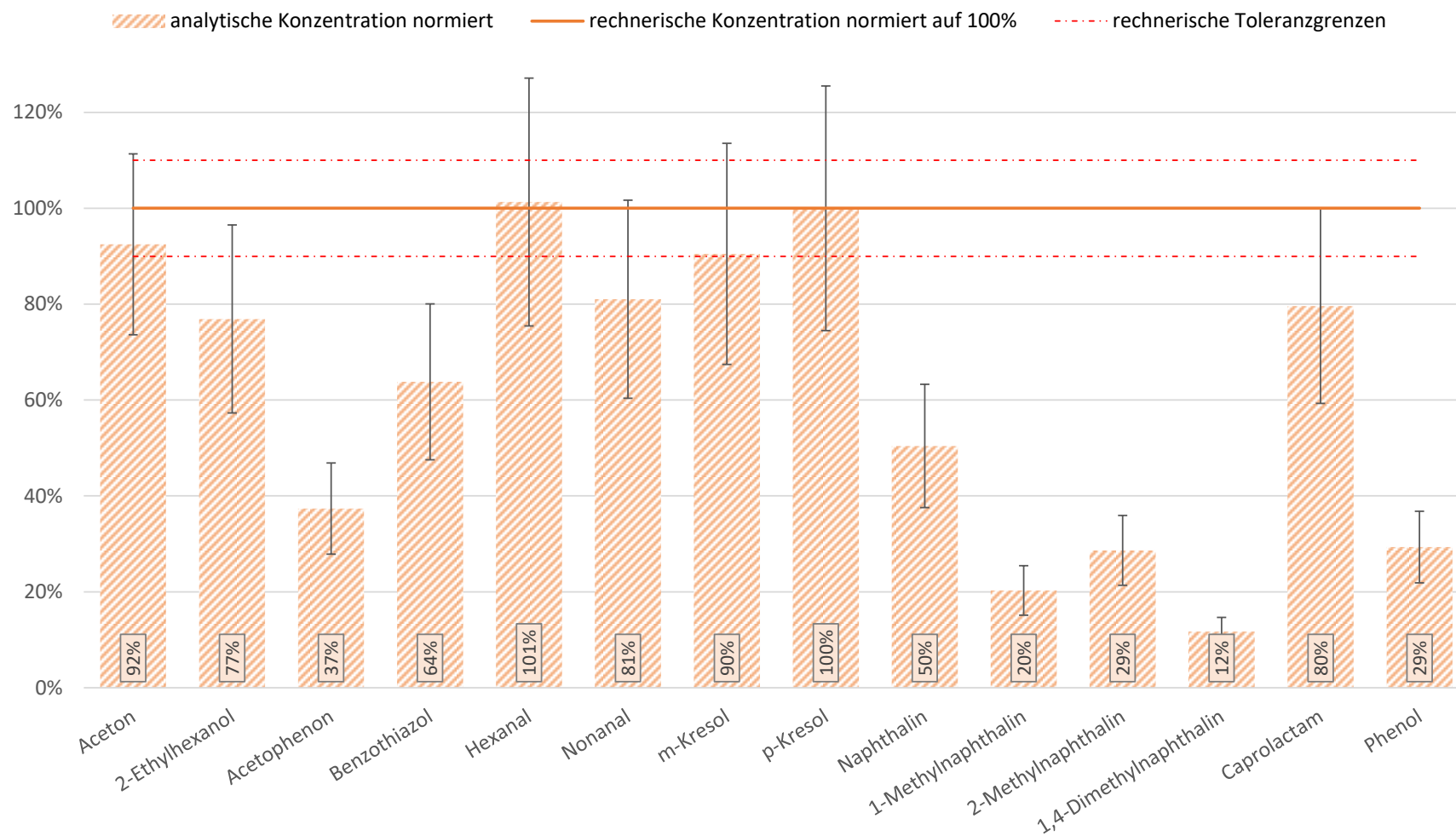
Die Unsicherheit der FID-Analyse wird entsprechend der Herstellerangaben zu 3,8% angenommen. Aus der Analyseunsicherheit des FID und der Unsicherheit in der Darbietung der Proben (20%) am Olfaktometer ergibt sich durch quadratische Addition ein Gesamtunsicherheitsbudget von 20,4%. Aus analytisch ermittelter Konzentration und 25,5% (bzw. 20,4%) Unsicherheitsbudget ergibt sich ein analytischer Konzentrationsbereich im Mutterbeutel.

In der folgenden Abbildung 45 sind die rechnerischen Konzentrationen der mittels FID und GC-MS quantifizierten Substanzen normiert zu 100% zusammen mit den rechnerischen Unsicherheitsbudgets von 10% aufgeführt. Die analytisch bestimmten Konzentrationen sind als Balkendiagramme mit zulässigen Standardabweichungen von 20,4 bzw. 25,5% dargestellt.

Die Quantifizierungen von Aceton, 2-Ethylhexanol, Hexanal, Nonanal, m-Kresol, p-Kresol und Caprolactam können aufgrund der Überschneidung der analytischen Konzentrationen inklusive der Unsicherheitsbudgets mit dem rechnerischen Toleranzbereich als plausibel eingestuft werden. Der rechnerisch ermittelte Wert ist damit für die Bestimmung der Geruchsschwellenkonzentration geeignet. Die sehr guten Wiederfindungsraten lassen sich beispielsweise für Aceton und Hexanal auch durch weitere Studien [Boeker et. al. 2014; Salthammer et. al. 2020] bestätigen.

Abbildung 45: Plausibilitätsüberprüfung rechnerischer Konzentrationen im Vergleich zur analytisch mittels FID und GC-MS ermittelten Konzentrationen

auf 100% normierte rechnerische Konzentration und analytische Konzentration mit Standardabweichung für alle Substanzen, die mittels FID und GC-MS quantifiziert werden konnten



Quelle: Olfasense GmbH

Für Acetophenon, Benzothiazol, Naphthalin, 1-Methylnaphthalin, 2-Methylnaphthalin, 1,4-Dimethylnaphthalin sowie Phenol ergibt sich keine Überschneidung, sodass die Plausibilität der Quantifizierung nicht gegeben ist. Es lassen sich jedoch folgende Erklärungen für diese Abweichungen finden:

- Acetophenon liegt bei Temperaturen unter 20°C als Feststoff vor, sodass für diesen Stoff von starken Ausfalleffekten im Nalophan®-Beutel bei Raumtemperatur ausgegangen werden muss. Eine mittlere Wiederfindungsrate von 37% lässt sich damit plausibel durch Ausfall- und Wandeffekte erklären.
- Für Benzothiazol konnten in weiteren Veröffentlichungen [Salthammer et. al. 2020] Wiederfindungsraten im Nalophan®-Beutel im Zeitraum von 3 Stunden von 80 bis 50% festgestellt werden. Der im Rahmen des Projektes gefundene Verlauf von 73 auf 56% innerhalb von 3 Stunden deckt sich sehr gut mit diesen Ergebnissen und plausibilisiert damit die gefundenen analytischen Konzentrationen für Benzothiazol.
- Für alle untersuchten Naphthaline konnten keine Literaturquellen für das Verhalten im Nalophan®-Beutel ermittelt werden. Da allerdings bei allen Naphthalinen deutliche Unterbefunde festgestellt wurden und diese Substanzen teilweise bei Raumtemperatur als Feststoffe vorliegen, ist auch hier von erheblichen Ausfall- und Wandeffekten im Nalophan®-Beutel auszugehen.
- Für Phenol werden Wiederfindungsraten im Nalophan®-Beutel von knapp über 20% dokumentiert [Boeker et. al. 2014], was eine gute Übereinstimmung mit den in diesem Projekt gefundenen knapp 29% ergibt.

Die Substanzen Essigsäure, Butansäure, Hexansäure, 2,4,6-Trichloranisol und 2-Butanonoxim konnten nicht hinreichend mittels GC-MS quantifiziert werden, sodass sie dem Plausibilitätsüberprüfungsprozess nicht unterzogen wurden. Zur Prüfung der Stabilität innerhalb des Nalophan®-Beutels wurden sie mittels GC-IMS vermessen.

Für Essig- und Butansäure reduzieren sich Wiederfindungsraten innerhalb eines Zeitraums von 3 Stunden nach der Befüllung eines Nalophan®-Beutels um 20 bis 40% [Kasper et. al. 2018]. Mittels GC-IMS-Messung wurde für Butansäure im Peak 2 eine Reduktion um bis zu 12% und für Essigsäure um bis zu 17% festgestellt. Relativ zum Soll-Wert gesehen liegen die Wiederfindungsraten nach [Kasper et. al. 2018] für Essigsäure zwischen 25% und 60% nach 3 Stunden und für Butansäure zwischen 40 und 70%. Es kann also von entsprechend geringeren Substanzkonzentrationen im Nalophan®-Beutel ausgegangen werden, als rechnerisch ermittelt.

Für Hexansäure ist für Peak 1 aus der GC-IMS-Messung (vergleiche Tabelle 125 in Kapitel 5.1) keiner Veränderung der Konzentration im Nalophan®-Beutel abzuleiten. Für den Peak 2 hingegen ergibt sich eine Reduktion der Wiederfindung um 28%. Eine Abnahme der Hexansäurekonzentration im Nalophan®-Beutel wurden bereits von [Salthammer et. al. 2016] beschrieben. Dabei waren insbesondere für Hexansäure 30 bis 60 Minuten nach Injektion in einen Nalophan®-Beutel nur noch 20 bis 30% der ursprünglichen Konzentration nachweisbar. In neueren Untersuchungen [Salthammer et. al. 2020] liegen die Wiederfindungsraten innerhalb der ersten 3 Stunden nach Befüllung des Beutels um 90% und damit deutlich höher. Eine sichere Aussage über die Wiederfindung der Hexansäure lässt sich damit nicht ableiten.

Für die Substanzen 2,4,6-Trichloranisol und 2-Butanonoxim lässt sich aus den mittels GC-IMS ermittelten Daten kein Anhaltspunkt für eine Abnahme der Konzentration im Nalophan®-Beutel über den betrachteten Zeitraum finden.

Da nicht alle Substanzen vollumfänglich mittels GC-MS oder FID quantifiziert werden konnten (siehe Substanzen in Tabelle 128, für die ausschließlich rechnerische Konzentrationen angegeben sind), werden die Geruchsschwellen im Folgenden auf Basis der rechnerischen Konzentrationen angegeben. Aufgrund der teils erheblichen Unterschiede zwischen rechnerischen und analytischen Substanzkonzentrationen ist es allerdings empfehlenswert für die Bestimmung der Geruchsschwelle den tatsächlichen analytischen Wert zugrunde zu legen. Für die Substanzen, die der Plausibilitätsbetrachtung (Abbildung 45) nicht standhalten, wird daher ein optionaler Geruchsschwellenwert auf Basis der analytischen Daten angegeben (siehe Substanzen mit „optionaler Geruchsschwelle (analytisch)“ in der folgenden Tabelle 128).

Tabelle 128: Geruchsschwellenwerte auf Basis rechnerischer und analytischer Substanzkonzentrationen im Mutterbeutel

Angabe des Erwartungswertes der Geruchsschwelle sowie der unteren und oberen Grenze auf Basis rechnerischer Daten. Im Falle von deutlichen Abweichungen rechnerischer und analytischer Daten auch Angabe der Geruchsschwelle auf Basis der analytischen Daten.

lfd. Nr.	Substanz	rechnerische Konzentration im Mutterbeutel [mg/m ³]	analytische Konzentration im Mutterbeutel [mg/m ³]	Geruchsschwelle (rechnerisch) unter Grenze des 95% Konfidenzintervalls Erwartungswert obere Grenze des 95% Konfidenzintervalls [mg/m ³]	optionale Geruchsschwelle (analytisch) unter Grenze des 95% Konfidenzintervalls Erwartungswert obere Grenze des 95% Konfidenzintervalls [mg/m ³]
01	Aceton	15029	13899	20,50 26,69 34,77	-
02	2-Ethylhexanol	92,2	70,9	0,098 0,127 0,166	-
03	Acetophenon	102,8	38,4	0,0059 0,0077 0,0100	0,0022 0,0029 0,0037
04	Benzo-thiazol	47,5	30,3	0,0041 0,0054 0,0070	0,0026 0,0034 0,0045
05	2-Phenoxyethanol	545,5	-	3,20 4,16 5,42	-
06	Butansäure	13,48	-	0,0008 0,0011 0,0014	-
07	Essigsäure	259,9	-	0,016 0,021 0,027	-

lfd. Nr.	Substanz	rechnerische Konzentration im Mutterbeutel [mg/m³]	analytische Konzentration im Mutterbeutel [mg/m³]	Geruchsschwelle (rechnerisch) <i>unter Grenze des 95% Konfidenzintervalls</i> Erwartungswert <i>obere Grenze des 95% Konfidenzintervalls</i> [mg/m³]	optionale Geruchsschwelle (analytisch) <i>unter Grenze des 95% Konfidenzintervalls</i> Erwartungswert <i>obere Grenze des 95% Konfidenzintervalls</i> [mg/m³]
08	Hexanal	19,94	20,2	0,0024 0,0031 0,0041	-
09	Nonanal	13,08	10,6	0,0021 0,0027 0,0035	-
10	m-Kresol	2,73	2,47	0,00022 0,00028 0,00036	-
11	Hexansäure	15,05	-	0,0122 0,0159 0,0208	-
12	p-Kresol	0,98	0,98	0,00028 0,00036 0,00047	-
13	2,4,6- Trichlor- anisol	2,26	-	0,000062 0,000080 0,000104	-
14	Naphthalin	2,42	1,22	0,0015 0,0019 0,0025	0,0007 0,0010 0,0013
15	1-Methyl- naphthalin	12,92	2,62	0,0070 0,0092 0,0119	0,0014 0,0019 0,0024
16	2-Methyl- naphthalin	3,98	1,14	0,0042 0,0055 0,0071	0,0012 0,0016 0,0020
17	1,4-Dimethyl- naphthalin	24,1	2,82	0,0277 0,0361 0,0471	0,0032 0,0042 0,0055
18	ε-Capro- lactam	24,35	19,38	0,3065 0,3992 0,5199	-
19	Phenol	17,42	5,11	0,0372 0,0484 0,0630	0,0109 0,0142 0,0185

Ifd. Nr.	Substanz	rechnerische Konzentration im Mutterbeutel [mg/m ³]	analytische Konzentration im Mutterbeutel [mg/m ³]	Geruchsschwelle (rechnerisch)	optionale Geruchsschwelle (analytisch)
				<i>unter Grenze des 95% Konfidenzintervalls Erwartungswert obere Grenze des 95% Konfidenzintervalls</i> [mg/m ³]	<i>unter Grenze des 95% Konfidenzintervalls Erwartungswert obere Grenze des 95% Konfidenzintervalls</i> [mg/m ³]
20	2-Butanon-oxim	5,69	-	0,21 0,27 0,35	-

6 Quellenverzeichnis

- Ad-hoc-Arbeitsgruppe Innenraumrichtwerte der Kommission Innenraumlufthygiene und der Obersten Landesgesundheitsbehörden „Gesundheitlich-hygienische Beurteilung von Geruchsstoffen in der Innenraumluft mithilfe von Geruchsleitwerten“ Bundesgesundheitsbl 2014 · 57:148–153
- VDI 3940-4:2010, Bestimmung der hedonischen Geruchswirkung – Polaritätenprofile (VDI 3940-4:2010), Verein Deutscher Ingenieure, Düsseldorf
- VDI 3882-1:1992, Olfaktometrie – Bestimmung der Geruchsintensität (VDI 3882-1:1992), Verein Deutscher Ingenieure, Düsseldorf
- DIN EN ISO/IEC 17025:2018, Allgemeine Anforderungen an die Kompetenz von Prüf- und Kalibrierlaboratorien (ISO/IEC 17025:2017), Beuth Verlag GmbH, Berlin
- DIN EN 13725:2003, Bestimmung der Geruchsstoffkonzentration mit dynamischer Olfaktometrie (DIN EN 13725:2003), Beuth Verlag GmbH, Berlin
- Technische Regeln für Gefahrstoffe: Arbeitsplatzgrenzwerte (TRGS 900). Ausg. 1/2006. BArbBl. Heft 1/2006 S. 41-55; Zuletzt geändert und ergänzt: GMBI 2019 S. 117-119 [Nr. 7] (v. 29.03.2019)
- Institut für Arbeitsschutz der Deutschen Gesetzlichen Unfallversicherung (IFA) (2019a): GESTIS International Limit Values. <https://limitvalue.ifa.dguv.de> (24.02.2020)
- Institut für Arbeitsschutz der Deutschen Gesetzlichen Unfallversicherung (IFA) (2019b): GESTIS-Stoffdatenbank. http://gestis.itrust.de/nxt/gateway.dll/gestis_de/000000.xml?f=templates&fn=default.htm&vid=gestisdeu:sdbdeu (24.02.2020)
- VWR International, LLC (2019): 2,4,6-Trichloranisol. <https://ch.vwr.com/store/product/de/754433/2-4-6-trichloranisol> (24.02.2020)
- Sigma Aldrich (2019): Sicherheitsdatenblätter (SDS). <https://www.sigmaaldrich.com/> (24.02.2020)
- Boeker P, Leppert J, Lammers P. Comparison of Odorant Losses at the ppb-Level from Sampling Bags of Nalophan™ and Tedlar™ and from Adsorption Tubes. Chemical Engineering Transactions 2014; 40: 157-162.
- Kasper P, Oxbøl A, Hansen M, Feilberg A. Mechanisms of Loss of Agricultural Odorous Compounds in Sample Bags of Nalophan, Tedlar, and PTFE. Journal of Environmental Quality 2018; 47: 246-253.
- Salthammer T, Schulz N, Stolte R, Monegel F, Uhde E: Sensory evaluation in test chambers: Influences of direct and indirect assessment. Building and Environment, Volume 172, April 2020, 106668
- Salthammer T, Schulz N, Stolte R, Uhde E, Bartsch J: Evaluierung einer Methode zur sensorischen Bewertung von Bauprodukten für Innenraumanwendungen unter Praxisbedingungen – Abschlussbericht zum Forschungsvorhaben; Fraunhofer WKI Fachbereich für Materialanalytik und Innenluftchemie, März 2016

A Anhang

A.1 Intensitätsbewertungen

A.1.1 Aceton

Tabelle 129: Aceton - Intensitätsbewertungen

Zusammenstellung individueller Intensitätsbewertungen in Abhängigkeit der dargebotenen Verdünnungsstufen und unter Angabe der Prüferkürzel

Nr. Proband / Kürzel	Nr. Wdh.	Intensitätsbewertung für die dargebotenen Verdünnungsstufen										Null- lüfte	
		lg Z ₁₉₉₆	lg Z ₉₆₈	lg Z ₅₀₅	lg Z ₂₄₇	lg Z ₁₂₉	lg Z _{65,8}	lg Z _{34,1}	lg Z _{17,7}	lg Z _{8,9}	lg Z _{4,5}	1	2
1 <i>NIN</i>	0	1	4	2	3	2	3	3	6	6	-	0	0
	1	2	1	1	2	3	3	4	4	6	-	0	0
	2	1	2	2	3	3	3	3	6	6	-	0	0
2 <i>HOP</i>	0	0	1	2	2	3	5	4	5	6	-	1	1
	1	0	0	1	2	3	4	5	5	6	-	0	1
	2	0	1	1	2	3	4	5	6	6	-	0	0
3 <i>Süm</i>	0	1	0	1	0	3	3	5	6	6	-	0	2
	1	0	2	2	0	3	4	4	5	6	-	1	0
	2	1	1	0	2	2	3	4	5	6	-	0	0
4 <i>BEM2</i>	0	0	1	0	0	1	2	3	6	6	-	1	1
	1	0	2	1	1	1	3	4	6	6	-	0	1
	2	0	1	0	1	1	2	3	4	5	-	0	0
5 <i>ADM</i>	0	0	1	1	2	2	4	4	6	6	-	0	0
	1	0	1	1	1	1	2	4	6	6	-	0	0
	2	0	1	2	2	3	3	4	5	6	6	0	0
6 <i>ADS</i>	0	0	1	0	1	1	2	3	3	4	-	0	0
	1	0	1	0	1	1	2	3	4	5	-	0	0
	2	0	1	1	1	1	2	3	4	4	6	0	0
7 <i>GIS</i>	0	0	1	0	1	2	3	3	5	6	-	1	0
	1	0	1	3	0	2	2	3	5	6	-	0	0
	2	0	0	0	1	2	3	3	5	6	6	0	0
8 <i>MAF</i>	0	0	1	1	2	3	3	3	4	5	-	1	0
	1	0	1	3	1	2	3	3	4	5	-	0	0
	2	0	1	1	2	2	3	4	5	4	5	0	0
9 <i>ELS</i>	0	2	4	4	3	4	5	6	-	6	-	2	1
	1	0	0	1	1	3	3	4	-	6	-	1	0
	2	1	1	2	1	4	4	6	-	6	-	0	1
10 <i>STB</i>	0	0	2	2	2	3	3	5	-	6	-	0	0
	1	3	2	3	4	4	5	5	-	6	-	0	0
	2	0	0	1	1	2	3	5	-	6	-	0	0
11 <i>SCI</i>	0	0	0	2	3	3	4	5	-	6	-	0	0
	1	1	2	2	2	3	4	5	-	6	-	0	0
	2	2	2	3	3	4	4	5	-	6	-	0	0
12 <i>SCL2</i>	0	0	0	1	1	2	3	5	-	6	-	1	1
	1	1	0	1	2	3	5	5	-	6	-	1	1
	2	0	1	1	1	2	2	4	-	6	-	1	0

A.1.2 2-Ethylhexanol

Tabelle 130: 2-Ethylhexanol - Intensitätsbewertungen

Zusammenstellung individueller Intensitätsbewertungen in Abhängigkeit der dargebotenen Verdünnungsstufen und unter Angabe der Prüferkürzel

Nr. Proband / Kürzel	Nr. Wdh.	Intensitätsbewertung für die dargebotenen Verdünnungsstufen										Null- lüfte	
		lg Z ₁₉₉₆	lg Z ₉₆₈	lg Z ₅₀₅	lg Z ₂₄₇	lg Z ₁₂₉	lg Z _{65,8}	lg Z _{34,1}	lg Z _{17,7}	lg Z _{8,9}	lg Z _{4,5}	1	2
1 LEJ	0	0	0	3	3	4	4	4	5	5		1	0
	1	0	2	3	4	3	4	5	5	6		1	1
	2	0	2	0	3	4	5	4	6	6		1	0
2 KOI	0	2	1	3	3	4	5	4	6	5		2	2
	1	1	0	1	3	3	4	5	5	6		0	1
	2	0	0	2	3	3	4	5	6	6		1	1
3 SCI	0	0	1	3	3	5	6	6	5	6		0	0
	1	0	0	3	3	4	5	5	5	4		0	0
	2	0	1	3	3	4	4	5	6	6		0	0
4 CHA	0	0	1	1	1	2	3	3	4	4		0	0
	1	0	0	1	2	2	3	3	4	5		0	0
	2	0	1	1	2	2	3	3	4	5		0	0
5 HAU	0	0	0	2	2	4	5	5	5	5		0	0
	1	1	0	2	3	4	5	5	5	5		0	0
	2	0	1	3	3	5	4	4	5	5		0	0
6 SCB	0	0	1	3	2	4	3	3	3	4		0	0
	1	1	1	3	1	3	4	3	3	4		0	0
	2	0	1	2	2	3	3	2	3	3		0	0
7 RIS2	0	0	0	1	2	3	3	4	3	4		1	0
	1	0	0	1	3	3	3	3	4	5		0	1
	2	0	0	0	1	2	3	3	3	4		0	0
8 BEM2	0	1	1	1	1	3	4	3	5	6		0	0
	1	0	1	1	1	2	4	2	3	6		0	0
	2	1	1	2	1	3	3	2	4	5		0	0
9 HAM4	0	0	0	2	2	3	5		6	4	6	0	1
	1	1	0	2	2	3	3		5	6	6	1	0
	2	0	1	0	1	2	3		4	5	6	2	0
10 ADS	0	1	0	1	2	3	4		5	6	5	0	0
	1	0	0	1	1	2	3		5	5	4	1	0
	2	0	0	1	1	2	3		4	4	5	0	0
11 ADM	0	0	1	1	3	3	4		4	4	5	0	0
	1	0	1	2	3	4	4		5	4	6	0	0
	2	0	1	2	3	3	4		5	6	6	0	0
12 MAF	0	1	2	3	4	4	4		4	5	5	0	0
	1	1	1	2	3	4	4		5	4	4	0	0
	2	1	1	1	3	4	4		4	5	5	0	1

A.1.3 Acetophenon

Tabelle 131: Acetophenon - Intensitätsbewertungen

Zusammenstellung individueller Intensitätsbewertungen in Abhängigkeit der dargebotenen Verdünnungsstufen und unter Angabe der Prüferkürzel

Nr. Proband / Kürzel	Nr. Wdh.	Intensitätsbewertung für die dargebotenen Verdünnungsstufen										Null- lüfte	
		lg Z ₇₀₄₀₇	lg Z ₃₅₀₇₁	lg Z ₁₆₁₃₈	lg Z ₇₈₇₂	lg Z ₃₉₈₉	lg Z ₁₉₄₀	lg Z ₉₄₇	lg Z ₅₃₆	lg Z ₂₇₄		1	2
1 TRV	0		2	1	2	3	3	5	5	6		0	0
	1		0	3	1	1	2	6	4	5		0	0
	2		0	0	0	1	3	5	4	4		0	0
2 BEM2	0		1	1	1	2	4	4	6	5		0	0
	1		1	0	1	2	3	5	4	6		0	0
	2		2	0	2	1	3	3	5	6		0	0
3 HAM4	0		0	0	1	2	3	3	4	5		0	0
	1		1	0	1	2	3	3	4	5		0	0
	2		0	1	1	1	3	3	4	5		0	0
4 KOR	0		0	1	2	3	4	4	5	5		0	0
	1		1	0	1	2	3	3	4	5		0	0
	2		0	0	1	2	3	4	4	5		0	0
5 MAF	0	0	0	3	1	3	4	5	5	6		0	0
	1	0	0	0	2	3	5	5	5	6		0	0
	2	0	0	0	2	3	4	5	5	5		0	0
6 SCL3	0	0	0	0	1	2	3	4	5	5		0	0
	1	0	0	0	2	3	5	6	6	6		0	0
	2	0	0	1	1	3	5	5	6	6		0	0
7 STB	0	0	0	1	2	2	4	3	5	5		0	0
	1	0	0	1	2	2	3	4	6	5		0	0
	2	0	0	1	1	2	3	6	4	6		0	0
8 SCI2	0	0	0	1	0	2	3	4	5	5		0	0
	1	0	0	0	1	3	4	3	5	6		0	0
	2	0	0	0	0	2	3	4	4	6		0	0
9 RAJ	0		0	1	0	3	4	4	4	5		0	0
	1		0	1	1	3	4	5	5	5		0	0
	2		0	0	1	2	4	5	5	5		0	0
10 RIS2	0		0	0	2	2	3	4	5	6		0	0
	1		0	0	1	1	3	3	4	4		0	0
	2		0	0	0	2	3	4	5	6		0	0
11 ELS	0		0	0	1	2	3	3	4	4		0	0
	1		0	0	1	2	3	3	4	4		0	0
	2		0	0	0	2	3	3	4	4		0	0
12 WEK	0		0	0	2	3	3	4	4	5		0	0
	1		1	1	1	2	3	4	4	5		0	0
	2		1	0	1	2	3	4	5	5		0	0

A.1.4 Benzothiazol

Tabelle 132: Benzothiazol – Intensitätsbewertungen

Zusammenstellung individueller Intensitätsbewertungen in Abhängigkeit der dargebotenen Verdünnungsstufen und unter Angabe der Prüferkürzel

Nr. Proband / Kürzel	Nr. Wdh.	Intensitätsbewertung für die dargebotenen Verdünnungsstufen										Null- lüfte	
		lg Z ₃₅₀₇₁	lg Z ₁₆₁₃₈	lg Z ₇₈₇₂	lg Z ₃₉₈₉	lg Z ₁₉₄₀	lg Z ₉₄₇	lg Z ₅₃₆	lg Z ₂₇₄	lg Z ₁₅₁	lg Z ₃₈	1	2
1 BEM2	0	0	1	2	1	2	3	4	4	5		0	0
	1	0	0	1	1	2	2	4	3	5	6	0	0
	2	0	1	1	0	2	4	3	3	4	6	0	0
2 SCL3	0	0	0	0	1	2	2	2	4	5		0	0
	1	0	0	0	1	1	2	2	3	4	5	0	0
	2	0	1	0	0	1	2	2	3	4	5	0	0
3 SCL2	0	0	1	2	2	3	3	4	4	4		0	0
	1	0	0	1	2	2	3	3	3	4	6	0	0
	2	0	0	1	2	2	3	4	4	5	6	0	0
4 JOA	0	0	1	2	2	2	3	4	3	4		0	0
	1	0	0	1	3	2	3	3	4	4	5	0	0
	2	0	0	0	2	2	3	3	3	4	5	0	0
5 SÜM	0	0	2	2	4	4	4	5	5	5	4	0	0
	1	0	0	1	3	3	3	5	4	4	4	0	0
	2	0	0	0	1	1	2	3	3	5	6	0	0
6 MAF	0	1	1	2	2	2	2	3	3	4	4	0	0
	1	0	1	1	2	2	2	3	3	4	4	0	0
	2	0	0	1	2	1	2	3	3	4	4	0	0
7 PEL	0	1	0	2	2	4	3	5	6	6	6	0	0
	1	1	1	2	2	3	4	3	5	6	6	0	0
	2	0	0	1	2	3	4	5	5	6	6	0	0
8 HAM4	0	0	1	2	3	3	4	4	4	5	6	0	0
	1	0	2	1	2	3	3	4	4	5	6	0	0
	2	0	0	1	2	2	3	3	5	5	6	0	0
9 SCL	0	0	1	3	2	2	3	2	3	4	5	0	0
	1	1	0	1	2	2	3	2	3	5	4	0	0
	2	0	0	1	1	2	1	4	3	3	5	0	0
10 KOI	0	3	2	4	3	4	4	5	5	5	6	0	0
	1	2	0	3	4	4	3	5	4	5	6	0	0
	2	0	1	3	4	3	3	4	4	5	6	0	0
11 RAJ	0	1	1	3	2	3	4	5	5	6	6	0	0
	1	1	0	1	2	2	3	4	4	6	6	0	0
	2	0	1	1	1	2	3	3	3	4	5	0	0
12 GRC	0	1	1	3	2	3	4	5	3	5	6	0	0
	1	0	1	2	3	3	4	5	4	5	6	0	0
	2	0	0	2	2	3	3	4	4	5	5	0	0

A.1.5 2-Phenoxyethanol

Tabelle 133: 2-Phenoxyethanol – Intensitätsbewertungen

Zusammenstellung individueller Intensitätsbewertungen in Abhängigkeit der dargebotenen Verdünnungsstufen und unter Angabe der Prüferkürzel

Nr. Proband / Kürzel	Nr. Wdh.	Intensitätsbewertung für die dargebotenen Verdünnungsstufen										Null- lüfte	
			lg Z ₉₄₇	lg Z ₅₃₆	lg Z ₂₇₄	lg Z ₁₅₁	lg Z ₇₀	lg Z ₃₈	lg Z _{19,6}	lg Z _{9,8}	lg Z _{4,9}	1	2
1 SÜM	0				0	2	1	2	3	4	5	0	0
	1				0	0	0	2	3	3	5	0	0
	2				0	0	1	3	4	4	6	0	0
2 SCL	0				0	1	1	3	3	3	4	0	0
	1				0	2	1	2	3	4	5	0	0
	2				1	1	1	2	3	4	5	0	0
3 MAF	0				0	1	1	3	2	3	4	0	0
	1				0	1	2	3	3	3	4	0	0
	2				0	1	1	3	3	3	5	0	0
4 JOA	0				0	1	1	2	2	3	4	0	0
	1				0	2	1	2	2	2	4	0	0
	2				0	1	1	2	2	3	4	0	0
5 GIJ	0				1	2	3	2	3	3	5	0	0
	1				0	1	1	2	4	4	5	0	0
	2				0	0	1	2	3	4	4	0	0
6 LEJ	0				0	1	2	3	3	4	5	0	0
	1				0	2	2	3	3	4	5	0	0
	2				0	1	1	3	3	4	5	0	0
7 KOI	0				1	1	2	3	4	3	5	0	0
	1				0	2	2	3	3	4	5	0	0
	2				1	1	1	3	3	4	5	0	0
8 BEM2	0				1	1	2	4	3	5	6	0	0
	1				1	1	2	4	3	5	6	0	0
	2				1	1	2	4	5	5	6	0	0
9 ELS	0		0	0	0	1	2	2	3	5	4	0	0
	1		0	0	0	2	1	4	3	5	5	0	0
	2		0	0	0	0	1	2	3	5	4	0	0
10 SCL3	0		0	0	0	3	2	4	2	5	6	0	0
	1		1	0	0	2	1	3	4	5	6	0	0
	2		0	0	1	2	1	3	4	5	5	0	0
11 RIS2	0		0	1	2	1	2	4	4	4	6	0	0
	1		0	1	2	3	3	4	4	6	6	0	0
	2		0	2	0	1	2	4	4	4	6	0	0
12 RAJ	0		0	0	1	3	2	4	3	5	6	0	0
	1		0	0	1	2	3	3	4	5	6	0	0
	2		0	0	0	1	1	2	2	4	4	0	0

A.1.6 Butansäure

Tabelle 134: Butansäure– Intensitätsbewertungen

Zusammenstellung individueller Intensitätsbewertungen in Abhängigkeit der dargebotenen Verdünnungsstufen und unter Angabe der Prüferkürzel

Nr. Proband / Kürzel	Nr. Wdh.	Intensitätsbewertung für die dargebotenen Verdünnungsstufen										Null- lüfte	
		lg Z ₇₀₄₀₇	lg Z ₃₅₀₇₁	lg Z ₁₆₁₃₈	lg Z ₇₈₇₂	lg Z ₃₉₈₉	lg Z ₁₉₄₀	lg Z ₉₄₇	lg Z ₅₃₆	lg Z ₂₇₄	lg Z ₁₅₁	1	2
1 SÜM	0		0	0	0	1	2	3	4	4	4	0	0
	1		0	0	0	1	1	3	4	4	5	0	0
	2		1	1	0	0	2	4	3	5	5	0	0
2 MAF	0		1	1	1	2	1	2	3	3	4	0	0
	1		1	0	1	2	3	3	3	4	4	0	0
	2		1	1	1	1	2	3	3	4	4	0	0
3 KOI	0		1	0	1	3	3	4	4	5	5	0	0
	1		1	1	1	2	2	3	4	4	5	0	0
	2		1	1	0	2	2	3	4	4	5	0	0
4 BEM2	0		1	0	1	2	1	2	4	5	6	0	0
	1		1	0	1	2	3	2	4	3	6	0	0
	2		0	0	0	2	1	2	5	5	6	0	0
5 FIH	0	0	1	1	1	2	1	4	4	5	5	0	0
	1	0	1	1	0	0	1	3	5	5	4	0	0
	2	0	1	2	0	0	2	3	4	5	3	0	0
6 SCL3	0	0	1	2	1	4	3	3	5	4	4	0	0
	1	0	1	0	1	1	2	4	3	3	4	0	0
	2	0	0	0	1	2	2	2	4	4	4	0	0
7 GIS	0	0	0	1	1	2	1	2	3	5	5	0	0
	1	0	0	1	0	1	2	3	3	3	5	0	0
	2	0	0	0	0	1	2	3	4	6	5	0	0
8 KOR	0	0	0	1	0	3	2	2	3	4	5	0	0
	1	0	0	3	1	2	1	3	4	5	6	0	0
	2	0	0	0	0	3	1	2	5	4	4	0	0
9 GIJ	0	0	0	0	2	3	3	4	5	5	6	0	0
	1	0	0	2	1	3	3	4	4	5	5	0	0
	2	0	1	1	1	2	2	3	4	5	5	0	0
10 SCL2	0	0	0	0	1	1	2	3	4	5	6	0	0
	1	0	0	1	0	2	1	2	4	4	4	0	0
	2	0	0	0	0	2	3	2	4	5	5	0	0
11 ADM	0	0	1	1	1	3	2	3	5	6	6	0	0
	1	0	0	1	1	3	3	3	3	5	5	0	0
	2	0	0	0	1	2	2	3	4	5	5	0	0
12 ADS	0	0	0	1	1	3	2	3	5	4	5	0	0
	1	0	0	1	1	2	2	2	5	4	4	0	0
	2	0	0	0	1	1	2	3	3	4	5	0	0

A.1.7 Essigsäure

Tabelle 135: Essigsäure – Intensitätsbewertungen

Zusammenstellung individueller Intensitätsbewertungen in Abhängigkeit der dargebotenen Verdünnungsstufen und unter Angabe der Prüferkürzel

Nr. Proband / Kürzel	Nr. Wdh.	Intensitätsbewertung für die dargebotenen Verdünnungsstufen										Null- lüfte	
		lg Z ₃₄₅₂₁	lg Z ₁₄₄₃₉	lg Z ₇₀₂₉	lg Z ₃₅₂₉	lg Z ₁₉₉₆	lg Z ₉₆₈	lg Z ₅₀₅	lg Z ₂₄₇	lg Z ₁₂₉	lg Z _{34,1}	1	2
1 SCL	0	0	1	2	2	3	3	4	4			0	0
	1	0	0	1	2	2	3	3	3	2	5	0	0
	2	2	0	1	1	2	3	3	4		6	0	0
2 STB	0	1	1	1	2	3	4	4	5			0	0
	1	0	0	1	1	3	3	2	2	3	4	0	0
	2	0	0	1	1	3	3	3	4		5	0	0
3 MEC	0	0	0	2	2	2	3	3	4			0	0
	1	0	0	0	1	2	2	1	3	3	4	0	0
	2	0	0	0	3	3	4	4	5	3	6	0	0
4 RAJ	0	1	1	2	1	3	3	3	3			0	0
	1	1	0	1	1	2	3	2	3	3	4	0	0
	2	1	0	2	1	2	3	3	3	3	5	0	0
5 HOP	0	0	1	2	2	4	5	5	5		6	0	0
	1	0	0	1	2	3	4	5	5		6	0	0
	2	0	1	2	3	4	5	5	6		6	0	0
6 KOI	0	0	0	2	3	3	4	4	5		4	0	0
	1	0	0	1	3	3	3	4	4		4	0	0
	2	0	1	2	3	3	5	4	4		6	0	0
7 HAM4	0	0	0	3	1	2	4	3	4		5	0	0
	1	0	0	1	0	2	3	3	4		5	0	0
	2	0	1	1	0	2	3	3	4		5	0	0
8 KOR	0	0	1	2	3	4	6	5	6		5	0	0
	1	0	0	1	2	3	5	4	4		6	0	0
	2	0	0	1	0	4	4	5	4		6	0	0
9 GÜU	0	0	1	0	1	2	1	2	3		4	0	0
	1	0	2	0	1	3	2	4	4		5	0	0
	2	0	1	2	0	3	3	4	4		4	0	0
10 TÄM	0	0	1	1	3	4	3	3	3		5	0	0
	1	0	0	1	3	4	4	4	4		6	0	0
	2	0	0	1	2	4	4	4	5		6	0	0
11 SCL3	0	0	1	1	2	3	3	3	4		6	0	0
	1	0	2	2	3	4	3	3	4		6	0	0
	2	0	0	2	3	3	3	4	4		6	0	0
12 RIS2	0	0	0	3	3	2	4	4	4		6	0	0
	1	1	0	2	1	3	3	4	4		5	0	0
	2	0	0	1	1	3	4	5	4		5	0	0

A.1.8 Hexanal

Tabelle 136: Hexanal – Intensitätsbewertungen

Zusammenstellung individueller Intensitätsbewertungen in Abhängigkeit der dargebotenen Verdünnungsstufen und unter Angabe der Prüferkürzel

Nr. Proband / Kürzel	Nr. Wdh.	Intensitätsbewertung für die dargebotenen Verdünnungsstufen										Null- lüfte	
		lg Z ₃₅₀₇₁	lg Z ₁₆₁₃₈	lg Z ₇₈₇₂	lg Z ₃₉₈₉	lg Z ₁₉₄₀	lg Z ₉₄₇	lg Z ₅₃₆	lg Z ₁₅₁			1	2
1 KOR	0	0	1	1	2	3	5	4	6			0	0
	1	0	0	0	2	3	5	4	6			0	0
	2	0	0	2	3	4	4	5	6			0	0
2 FIH	0	0	0	1	1	1	3	3	4			0	0
	1	0	1	1	1	2	3	3	5			0	0
	2	0	0	0	1	2	3	4	5			0	0
3 GÖR	0	1	1	1	3	2	4	4	5			0	0
	1	1	1	2	3	4	4	4	5			0	0
	2	0	1	1	2	3	4	4	5			0	0
4 SCL3	0	0	1	2	2	2	3	3	6			0	0
	1	0	0	2	1	2	4	4	6			0	0
	2	0	0	1	2	3	3	5	6			0	0
5* BES	0	0	0	1	1	3	5	4	6			0	0
	1	0	0	0	2	3	5	5	6			0	0
	2	0	0	1	1	3	5	6	6			0	0
6* MEC	0	0	0	0	1	2	3	4	5			0	0
	1	0	0	0	0	1	3	4	6			0	0
	2	0	0	0	0	1	3	5	6			0	0
7* GIJ	0	0	0	1	2	3	3	4	5			0	0
	1	0	0	1	2	3	4	5	6			0	0
	2	1	0	1	2	3	4	4	5			0	0
8* TÄM	0	0	0	1	2	3	4	5	6			0	0
	1	1	1	0	1	3	5	6	6			0	0
	2	0	0	1	2	4	5	4	6			0	0
9 BRL2	0	0	1	1	1	3	3	3	5			0	0
	1	0	0	2	1	2	3	3	5			0	0
	2	0	0	1	1	3	4	4	6			0	0
10 STB	0	1	0	1	1	2	2	3	5			0	0
	1	0	1	0	1	2	3	3	5			0	0
	2	0	1	0	1	2	3	3	6			0	0
11 HAM4	0	0	1	1	2	3	4	4	6			0	0
	1	0	1	1	1	3	3	4	6			0	0
	2	0	0	2	2	3	4	3	6			0	0
12 LEJ	0	0	1	2	2	4	4	4	5			0	0
	1	0	1	0	2	3	4	4	5			0	0
	2	0	0	2	2	4	3	4	5			0	0

* Verdünnungsstufen: 34521; 14439; 7029; 3529; 1996; 968; 505; 129

A.1.9 Nonanal

Tabelle 137: Nonanal - Intensitätsbewertungen

Zusammenstellung individueller Intensitätsbewertungen in Abhängigkeit der dargebotenen Verdünnungsstufen und unter Angabe der Prüferkürzel

Nr. Proband / Kürzel	Nr. Wdh.	Intensitätsbewertung für die dargebotenen Verdünnungsstufen										Null- lüfte	
		lg Z ₁₆₁₃₈	lg Z ₁₇₈₇₂	lg Z ₃₉₈₉	lg Z ₁₉₄₀	lg Z ₉₄₇	lg Z ₅₃₆	lg Z ₂₇₄	lg Z ₁₅₁			1	2
1 STB	0	0	0	0	1	3	5	6	6			0	0
	1	0	0	0	1	3	4	5	5			0	0
	2	0	0	0	1	3	5	4	6			0	0
2 GIJ	0	0	0	1	2	3	3	4	5			0	0
	1	0	0	1	2	4	4	5	5			0	0
	2	0	0	1	2	3	4	5	5			0	0
3 KOR	0	0	1	2	3	4	4	6	5			0	0
	1	0	1	1	3	3	4	5	5			0	0
	2	0	0	1	3	4	5	4	5			0	0
4 TÄM	0	0	1	1	3	3	3	5	5			0	0
	1	0	0	2	3	3	4	5	5			0	0
	2	0	1	2	2	3	4	5	5			0	0
5 ELS	0	0	0	1	1	3	4	4	5			0	0
	1	0	0	1	2	3	4	4	5			0	0
	2	0	0	0	2	3	4	4	5			0	0
6 SCL	0	0	1	1	2	3	4	5	4			0	0
	1	0	0	0	2	3	4	4	5			0	0
	2	0	0	1	2	3	3	4	5			0	0
7 HAM4	0	0	1	2	3	3	4	5	6			0	0
	1	0	1	1	2	3	4	5	6			0	0
	2	0	0	1	2	3	4	5	6			0	0
8 MEC	0	0	1	1	2	4	4	5	4			0	0
	1	0	1	1	2	3	3	5	5			0	0
	2	0	0	1	2	3	4	5	5			0	0
9 MAF	0	0	1	2	3	3	4	5	5			0	0
	1	0	1	1	3	2	3	4	5			0	0
	2	0	1	2	3	3	4	4	5			0	0
10 KOI	0	0	1	0	2	3	4	4	5			0	0
	1	0	1	0	2	3	4	4	6			0	0
	2	0	1	0	3	4	4	4	5			0	0
11 RAJ	0	0	0	1	2	3	4	4	5			0	0
	1	0	1	1	2	3	4	4	4			0	0
	2	0	1	1	1	2	3	4	4			0	0
12 MAE	0	0	1	1	2	2	4	5	5			0	0
	1	0	1	0	2	3	4	5	5			0	0
	2	0	0	0	3	2	4	5	5			0	0

A.1.10 m-Kresol

Tabelle 138: m-Kresol - Intensitätsbewertungen

Zusammenstellung individueller Intensitätsbewertungen in Abhängigkeit der dargebotenen Verdünnungsstufen und unter Angabe der Prüferkürzel

Nr. Proband / Kürzel	Nr. Wdh.	Intensitätsbewertung für die dargebotenen Verdünnungsstufen										Null- lüfte	
		lg Z ₇₀₄₀₇	lg Z ₃₅₀₇₁	lg Z ₁₆₁₃₈	lg Z ₇₈₇₂	lg Z ₃₉₈₉	lg Z ₁₉₄₀	lg Z ₉₄₇	lg Z ₅₃₆	lg Z ₂₇₄		1	2
1 <i>FIH</i>	0	0	0	0	2	2	3	5	6			0	0
	1		0	1	1	2	2	2	4	4		0	0
	2		0	1	1	2	2	4	3	4		0	0
2 <i>PEL</i>	0	0	1	0	2	2	2	4	4			0	0
	1		0	1	1	1	3	4	4	5		0	0
	2		0	0	1	2	2	4	3	5		0	0
3 <i>KOR</i>	0	0	0	1	3	3	4	5	6			0	0
	1		0	1	2	3	4	4	5	6		0	0
	2		0	1	2	2	3	5	4	6		0	0
4 <i>SCL</i>	0	1	1	0	2	2	3	3	4			0	0
	1		1	1	2	1	3	4	4	5		0	0
	2		1	1	1	2	3	3	4	4		0	0
5 <i>LEJ</i>	0		0	0	1	2	3	4	3	5		0	0
	1		0	1	1	1	3	4	4	5		0	0
	2		0	0	2	2	3	3	4	5		0	0
6 <i>RAJ</i>	0		1	0	2	1	2	3	3	4		0	0
	1		0	0	1	2	2	3	5	5		0	0
	2		0	0	1	1	2	2	3	5		0	0
7 <i>ELS</i>	0		0	0	2	1	3	4	4	4		0	0
	1		0	0	0	0	2	3	3	4		0	0
	2		0	0	1	1	2	3	3	4		0	0
8 <i>DöC</i>	0		0	1	2	2	2	3	3	4		0	0
	1		0	0	1	1	2	3	3	5		0	0
	2		0	0	1	1	3	2	4	5		0	0
9 <i>STB</i>	0		0	1	1	1	2	3	3	5		0	0
	1		0	0	1	1	2	3	3	5		0	0
	2		0	0	0	1	2	2	4	5		0	0
10 <i>HAM4</i>	0		0	0	1	2	2	3	4	5		0	0
	1		0	0	1	2	3	4	3	5		0	0
	2		0	0	1	1	2	3	3	5		0	0
11 <i>JOA</i>	0		2	0	2	2	3	3	4	5		0	0
	1		0	0	2	1	2	3	3	4		0	0
	2		0	0	1	2	3	3	3	4		0	0
12 <i>SüM</i>	0		1	1	2	2	3	4	4	4		0	0
	1		0	0	1	1	3	4	3	4		0	0
	2		0	0	0	3	2	4	4	6		0	0

A.1.11 Hexansäure

Tabelle 139: Hexansäure - Intensitätsbewertungen

Zusammenstellung individueller Intensitätsbewertungen in Abhängigkeit der dargebotenen Verdünnungsstufen und unter Angabe der Prüferkürzel

Nr. Proband / Kürzel	Nr. Wdh.	Intensitätsbewertung für die dargebotenen Verdünnungsstufen										Null- lüfte	
		lg Z ₁₂₇	lg Z ₂₀₃₄	lg Z ₉₉₉	lg Z ₅₀₀	lg Z ₂₅₃	lg Z ₁₃₇	lg Z ₆₅	lg Z ₃₅	lg Z _{17,9}	lg Z ₉	1	2
1 MEC	0		0	1	2	3	3	4	5	5		0	0
	1	0	0	1	1	3	3	4	4	5	5	0	0
	2	0	0	0	2	3	4	5	5	6	6	0	0
2 SCO	0		0	2	2	3	3	4	4	4		0	0
	1	0	0	1	2	3	3	4	5	5	4	0	0
	2	0	0	1	2	3	4	4	5	4	5	0	0
3 GÖR	0		1	2	2	3	3	4	4	5		0	0
	1	0	0	1	3	3	3	4	4	4	4	0	0
	2	0	0	0	2	3	3	4	4	5	5	0	0
4 MOF	0		0	2	2	3	3	4	4	3		0	0
	1	0	0	0	2	3	4	3	4	4	5	0	0
	2	0	0	1	2	2	4	3	6	5	5	0	0
5 RAJ	0	0	1	0	3	2	4	5	5	6	5	0	0
	1	1	0	1	2	3	4	5	6	6	6	0	0
	2	1	0	1	1	2	3	3	5	5	5	0	0
6 TäM	0	1	1	0	3	3	5	5	6	6	6	0	0
	1	1	0	1	2	3	5	5	6	6	6	0	0
	2	0	0	1	1	3	3	4	6	5	6	0	0
7 ELS	0	0	0	2	2	3	4	5	4	5	5	0	0
	1	0	0	2	2	3	4	4	5	5	5	0	0
	2	0	0	1	1	3	4	3	5	5	5	0	0
8 PEL	0	0	1	2	2	3	4	5	5	5	5	0	0
	1	1	1	1	2	3	3	4	5	5	5	0	0
	2	0	0	1	2	3	3	4	5	5	5	0	0
9 STB	0	0	0	1	1	2	3	5	5	6	6	0	0
	1	0	0	0	0	1	4	3	6	6	6	0	0
	2	0	0	0	1	2	3	4	6	5	6	0	0
10 BRL2	0	0	1	1	2	3	4	4	5	6	6	0	0
	1	0	0	1	2	3	4	4	5	5	6	0	0
	2	0	1	0	1	3	4	4	5	5	6	0	0
11 HAM4	0	0	0	1	2	2	3	4	4	4	5	0	0
	1	0	0	1	1	2	3	3	4	5	5	0	0
	2	0	0	1	2	3	4	4	5	5	5	0	0
12 KOR	0	1	1	2	3	4	4	5	6	6	6	0	0
	1	1	0	2	2	3	3	5	6	5	5	0	0
	2	1	1	2	3	4	3	5	5	6	6	0	0

A.1.12 p-Kresol

Tabelle 140: p-Kresol - Intensitätsbewertungen

Zusammenstellung individueller Intensitätsbewertungen in Abhängigkeit der dargebotenen Verdünnungsstufen und unter Angabe der Prüferkürzel

Nr. Proband / Kürzel	Nr. Wdh.	Intensitätsbewertung für die dargebotenen Verdünnungsstufen										Null- lüfte	
		lg Z ₈₁₂₁	lg Z ₄₁₂₇	lg Z ₂₀₃₄	lg Z ₉₉₉	lg Z ₅₀₀	lg Z ₂₅₃	lg Z ₁₃₇	lg Z ₆₅	lg Z _{4,8}		1	2
1 STB	0	1	1	2	3	3	5	4	6	6		0	0
	1	0	0	1	2	2	3	3	3	5		0	0
	2	0	0	2	1	2	3	3	4	5		0	0
2 MOF	0	0	0	1	2	2	4	4	4	5		0	0
	1	0	0	0	0	1	2	2	3	5		0	0
	2	0	0	0	0	1	2	2	3	5		0	0
3 SCO	0	1	0	2	2	2	2	4	5	6		0	0
	1	0	0	1	1	2	4	3	5	6		0	0
	2	0	0	0	1	2	3	3	4	5		0	0
4 SüM	0	3	2	2	4	4	4	4	4	6		0	0
	1	0	1	0	1	2	4	4	4	6		0	0
	2	0	0	0	0	3	3	4	4	5		0	0
5 KEH	0	0	0	2	2	1	2	3	3	5		0	0
	1	0	0	1	1	2	2	3	3	5		0	0
	2	0	0	1	1	2	2	3	3	4		0	0
6 SEH	0	0	0	0	3	3	4	3	4	5		0	0
	1	0	0	0	2	2	3	4	4	5		0	0
	2	0	1	1	1	1	4	3	5	4		0	0
7 HAM4	0	1	2	2	3	4	5	5	6	6		0	0
	1	2	0	2	3	3	4	4	5	6		0	0
	2	0	1	1	3	3	4	4	5	6		0	0
8 HAE	0	2	1	2	4	3	4	5	5	6		0	0
	1	1	0	2	3	4	5	5	6	6		0	0
	2	1	2	3	3	4	5	5	5	6		0	0
9 RAJ	0	1	1	2	2	3	4	3	4	5		0	0
	1	0	0	1	2	2	3	4	4	5		0	0
	2	0	1	1	3	1	2	3	4	5		0	0
10 KOI	0	1	2	2	4	3	4	5	6	6		0	0
	1	0	1	2	3	3	4	4	5	6		0	0
	2	0	0	2	2	3	3	4	5	6		0	0
11 MEC	0	1	1	1	3	1	3	4	5	6		0	0
	1	0	0	0	1	1	2	3	4	6		0	0
	2	0	0	0	1	1	1	3	4	6		0	0
12 ELS	0	1	0	1	3	4	3	4	5	6		0	0
	1	1	0	2	3	4	3	4	5	6		0	0
	2	0	0	1	3	3	2	4	5	6		0	0

A.1.13 2,4,6-Trichloranisol

Tabelle 141: 2,4,6-Trichloranisol - Intensitätsbewertungen

Zusammenstellung individueller Intensitätsbewertungen in Abhängigkeit der dargebotenen Verdünnungsstufen und unter Angabe der Prüferkürzel

Nr. Proband / Kürzel	Nr. Wdh.	Intensitätsbewertung für die dargebotenen Verdünnungsstufen										Null- lüfte	
		lg Z ₆₈₉₁₈	lg Z ₃₅₁₂₀	lg Z ₁₆₅₄₉	lg Z ₆₁₂₁	lg Z ₄₁₂₇	lg Z ₂₀₃₄	lg Z ₉₉₉	lg Z ₆₅			1	2
1 RAJ	0	0	1	2	2	4	4	5	5			0	0
	1	1	1	3	2	2	4	4	5			0	0
	2	0	1	3	2	2	4	4	5			0	0
2 TäM	0	1	0	3	2	4	5	5	5			0	0
	1	1	2	4	3	3	5	5	6			0	0
	2	1	1	3	3	4	5	6	6			0	0
3 MOF	0	0	1	2	2	3	4	4	4			0	0
	1	0	0	2	3	3	4	4	5			0	0
	2	1	0	3	1	1	4	4	5			0	0
4 GIJ	0	1	0	2	2	3	4	5	4			0	0
	1	1	0	2	2	4	5	5	5			0	0
	2	0	0	2	3	2	5	4	4			0	0
5 BRL2	0	0	3	2	0	1	3	1	4			0	0
	1	0	1	2	4	1	4	4	5			0	0
	2	0	0	1	3	1	4	4	2			0	0
6 ERF	0	1	1	2	2	1	2	3	4			0	0
	1	0	1	1	4	2	4	4	4			0	0
	2	1	1	1	4	1	4	4	4			0	0
7 HAM4	0	0	1	2	0	2	4	5	6			0	0
	1	1	0	3	3	3	5	4	5			0	0
	2	1	1	2	3	3	4	5	6			0	0
8 BES	0	0	1	2	4	2	3	4	4			0	0
	1	0	0	2	2	3	4	5	5			0	0
	2	1	1	3	2	3	4	4	4			0	0
9 STB	0	1	1	3	2	2	5	5	5			0	0
	1	1	2	3	4	3	5	5	6			0	0
	2	1	0	2	4	2	4	5	6			0	0
10 KOR	0	0	0	2	2	3	5	4	6			0	0
	1	1	2	1	4	3	2	3	5			0	0
	2	1	2	4	1	3	5	4	5			0	0
11 MEC	0	0	0	2	1	1	4	3	4			0	0
	1	0	0	2	4	1	3	5	6			0	0
	2	0	0	2	1	1	3	4	5			0	0
12 HAE	0	0	1	1	3	2	4	4	3			0	0
	1	0	0	4	2	3	5	4	6			0	0
	2	1	3	3	3	4	6	5	5			0	0

A.1.14 Naphthalin

Tabelle 142: Naphthalin - Intensitätsbewertungen

Zusammenstellung individueller Intensitätsbewertungen in Abhängigkeit der dargebotenen Verdünnungsstufen und unter Angabe der Prüferkürzel

Nr. Proband / Kürzel	Nr. Wdh.	Intensitätsbewertung für die dargebotenen Verdünnungsstufen										Null- lüfte	
		lg Z ₆₁₂₁	lg Z ₄₁₂₇	lg Z ₂₀₃₄	lg Z ₉₉₉	lg Z ₅₀₀	lg Z ₂₅₃	lg Z ₁₃₇	lg Z ₃₅			1	2
1 BRL2	0	0	0	1	2	3	4	5	6			0	0
	1	0	0	1	2	3	5	5	6			0	0
	2	1	0	1	2	3	5	5	6			0	0
2 KOI	0	0	1	1	3	4	4	4	6			0	0
	1	1	0	2	2	3	4	4	6			0	0
	2	1	0	2	3	3	4	5	6			0	0
3 SCL	0	0	1	2	2	3	4	5	6			0	0
	1	0	0	1	2	3	5	5	6			0	0
	2	0	0	1	2	2	4	5	6			0	0
4 SüM	0	0	0	0	1	2	3	5	6			0	0
	1	0	0	1	1	2	4	4	5			0	0
	2	0	0	2	1	2	3	4	5			0	0
5 MEC	0	0	0	0	0	2	3	3	5			0	0
	1	0	0	0	2	1	3	4	5			0	0
	2	0	0	0	1	1	3	4	5			0	0
6 MOF	0	0	0	1	1	1	2	3	5			0	0
	1	0	0	1	1	1	3	3	4			0	0
	2	0	0	1	2	1	2	3	5			0	0
7 DOA	0	0	1	1	2	3	3	4	5			0	0
	1	0	0	1	1	2	2	3	4			0	0
	2	0	0	1	1	1	2	3	4			0	0
8 GöR	0	0	1	0	1	2	3	4	5			0	0
	1	0	1	1	1	1	2	3	5			0	0
	2	0	0	1	0	1	3	4	6			0	0
9 STB	0	0	0	2	2	3	5	5	6			0	0
	1	0	0	1	0	3	3	4	6			0	0
	2	0	0	0	1	2	3	5	6			0	0
10 SAM	0	0	0	0	1	2	3	4	5			0	0
	1	0	0	0	1	1	3	4	5			0	0
	2	0	0	0	1	1	3	4	5			0	0
11 LIM4	0	0	1	2	2	3	3	5	6			0	0
	1	0	0	0	2	2	4	3	6			0	0
	2	0	0	0	0	1	3	3	5			0	0
12 JOA	0	0	0	0	1	3	4	5	5			0	0
	1	0	0	0	0	1	3	4	6			0	0
	2	0	0	0	0	2	3	4	6			0	0

A.1.15 1-Methylnaphthalin

Tabelle 143: 1-Methylnaphthalin - Intensitätsbewertungen

Zusammenstellung individueller Intensitätsbewertungen in Abhängigkeit der dargebotenen Verdünnungsstufen und unter Angabe der Prüferkürzel

Nr. Proband / Kürzel	Nr. Wdh.	Intensitätsbewertung für die dargebotenen Verdünnungsstufen										Null- lüfte	
		lg Z ₃₅₉₂	lg Z ₂₀₃₀	lg Z ₉₈₃	lg Z ₄₈₆	lg Z ₂₃₅	lg Z ₁₂₂	lg Z ₆₂	lg Z _{16,8}			1	2
1 <i>LIM4</i>	0	0	0	1	2	3	5	6	6			0	0
	1	0	0	1	2	3	4	4	5			0	0
	2	0	0	2	1	2	3	4	5			0	0
2 <i>KOI</i>	0	0	1	2	4	3	3	5	5			0	0
	1	0	0	1	2	3	4	4	5			0	0
	2	0	0	1	2	3	3	4	5			0	0
3 <i>SCO</i>	0	0	0	1	2	3	4	5	6			0	0
	1	0	0	1	2	3	4	4	5			0	0
	2	0	0	1	1	2	3	4	5			0	0
4 <i>JOA</i>	0	0	0	1	3	3	4	5	5			0	0
	1	0	2	1	1	3	4	5	5			0	0
	2	0	0	1	1	4	3	4	5			0	0
5 <i>BOJ2</i>	0	0	1	2	3	4	4	6	6			0	0
	1	1	0	2	3	3	5	5	5			0	0
	2	0	1	2	2	3	4	5	5			0	0
6 <i>THM</i>	0	0	0	1	3	3	4	4	5			0	0
	1	0	0	1	2	2	4	4	4			0	0
	2	0	0	2	1	4	3	4	5			0	0
7 <i>SCS</i>	0	1	1	2	2	4	5	5	6			0	0
	1	1	1	3	3	4	5	5	6			0	0
	2	0	1	2	3	3	4	5	6			0	0
8 <i>MOF</i>	0	0	1	1	2	2	3	4	5			0	0
	1	0	0	2	2	2	3	4	5			0	0
	2	0	0	2	2	3	2	4	6			0	0
9 <i>BRL2</i>	0	0	1	3	3	3	4	5	6			0	0
	1	0	1	2	3	3	4	5	6			0	0
	2	0	0	2	3	3	4	5	6			0	0
10 <i>DöM</i>	0	1	2	3	3	4	4	5	6			0	0
	1	0	0	2	3	3	4	5	6			0	0
	2	0	0	2	3	3	5	5	6			0	0
11 <i>MEC</i>	0	0	0	2	3	3	4	5	6			0	0
	1	0	0	2	2	3	4	6	6			0	0
	2	0	0	1	2	2	3	4	6			0	0
12 <i>RAJ</i>	0	0	1	2	3	4	5	6	6			0	0
	1	0	1	1	2	3	4	5	6			0	0
	2	0	0	1	2	3	3	5	6			0	0

A.1.16 2-Methylnaphthalin

Tabelle 144: 2-Methylnaphthalin - Intensitätsbewertungen

Zusammenstellung individueller Intensitätsbewertungen in Abhängigkeit der dargebotenen Verdünnungsstufen und unter Angabe der Prüferkürzel

Nr. Proband / Kürzel	Nr. Wdh.	Intensitätsbewertung für die dargebotenen Verdünnungsstufen										Null- lüfte	
		lg Z ₀₃₀	lg Z ₉₈₃	lg Z ₄₈₆	lg Z ₂₃₅	lg Z ₁₂₂	lg Z ₆₂	lg Z ₃₂	lg Z _{8,4}			1	2
1 SAM	0	0	1	1	2	3	4	5	6			0	0
	1	0	0	1	3	4	4	5	6			0	0
	2	0	1	1	2	4	4	6	6			0	0
2 KOI	0	0	1	3	2	4	4	5	6			0	0
	1	0	1	2	3	4	3	5	6			0	0
	2	0	1	2	3	4	4	5	6			0	0
3 STB	0	0	1	2	3	4	5	6	6			0	0
	1	0	1	1	3	4	4	5	6			0	0
	2	0	1	2	3	3	4	5	6			0	0
4 SCS	0	0	1	2	2	3	4	5	6			0	0
	1	0	1	1	2	3	4	5	6			0	0
	2	0	1	1	2	3	4	5	6			0	0
5 ADS	0	0	1	2	3	4	4	5	6			0	0
	1	0	0	0	2	3	4	5	6			0	0
	2	0	0	0	1	3	4	5	5			0	0
6 ADM	0	0	1	1	3	4	4	5	6			0	0
	1	0	1	1	3	4	4	5	6			0	0
	2	0	1	1	2	3	4	4	6			0	0
7 MEC	0	0	0	2	3	4	5	5	6			0	0
	1	0	0	0	3	3	4	6	6			0	0
	2	0	0	0	2	2	4	4	6			0	0
8 KöD	0	0	0	0	2	4	3	4	5			0	0
	1	0	0	1	2	3	4	5	6			0	0
	2	0	0	0	1	2	3	5	6			0	0
9 STS	0	0	0	2	2	3	3	5	6			0	0
	1	0	0	1	2	3	3	5	6			0	0
	2	0	0	0	2	3	3	4	5			0	0
10 DöM	0	0	0	2	3	4	5	5	6			0	0
	1	0	1	1	3	4	4	5	6			0	0
	2	0	0	1	3	4	4	5	6			0	0
11 RAJ	0	0	1	0	2	4	4	6	6			0	0
	1	0	0	1	3	3	4	5	6			0	0
	2	0	0	0	2	4	5	5	6			0	0
12 SCO	0	0	0	2	3	3	5	6	5			0	0
	1	0	0	1	2	3	3	4	5			0	0
	2	0	0	1	2	3	3	5	5			0	0

A.1.17 1,4-Dimethylnaphthalin

Tabelle 145: 1,4-Dimethylnaphthalin - Intensitätsbewertungen

Zusammenstellung individueller Intensitätsbewertungen in Abhängigkeit der dargebotenen Verdünnungsstufen und unter Angabe der Prüferkürzel

Nr. Proband / Kürzel	Nr. Wdh.	Intensitätsbewertung für die dargebotenen Verdünnungsstufen										Null- lüfte	
		lg Z ₀₃₄	lg Z ₉₉₉	lg Z ₅₀₀	lg Z ₂₅₃	lg Z ₁₃₇	lg Z ₆₅	lg Z ₃₅	lg Z _{17,9}			1	2
1 KOR	0	2	2	4	4	5	5	6	6			0	0
	1	1	1	3	3	4	5	5	6			0	0
	2	1	0	2	3	4	5	5	6			0	0
2 TäM	0	2	2	3	4	5	5	6	6			0	0
	1	1	2	3	3	4	5	6	6			0	0
	2	1	1	3	2	4	5	6	6			0	0
3 ELS	0	0	0	4	3	4	5	5	6			0	0
	1	0	0	3	1	3	4	5	6			0	0
	2	0	0	3	2	4	5	6	6			0	0
4 GIJ	0	0	1	2	3	4	4	5	6			0	0
	1	1	1	3	2	5	6	6	6			0	0
	2	0	0	2	2	5	5	5	6			0	0
5 MOF	0	0	1	1	2	2	3	4	5			0	0
	1	0	0	1	1	2	3	4	5			0	0
	2	0	0	1	1	1	3	4	5			0	0
6 SCL	0	1	1	2	3	3	5	4	5			0	0
	1	0	1	1	2	3	4	5	5			0	0
	2	1	0	2	1	2	3	5	5			0	0
7 NIN	0	1	1	2	3	4	3	5	5			0	0
	1	1	1	2	2	3	4	5	5			0	0
	2	1	1	2	2	3	4	5	5			0	0
8 SCO	0	0	1	2	3	3	5	4	5			0	0
	1	0	0	1	2	2	3	4	4			0	0
	2	0	0	1	2	3	4	4	5			0	0
9 BEA	0	2	1	2	2	3	3	4	4			0	0
	1	1	0	3	3	3	4	4	4			0	0
	2	1	0	2	1	3	4	4	4			0	0
10 THM	0	1	1	2	3	3	3	4	4			0	0
	1	0	0	1	1	3	3	4	4			0	0
	2	0	0	1	1	2	3	4	4			0	0
11 JOA	0	0	0	2	3	4	4	5	5			0	0
	1	0	0	1	3	3	4	5	5			0	0
	2	0	0	2	3	3	4	4	5			0	0
12 DOA	0	1	1	2	3	2	3	4	5			0	0
	1	1	1	1	2	2	4	4	5			0	0
	2	0	1	1	2	3	5	4	5			0	0

A.1.18 Caprolactam

Tabelle 146: Caprolactam - Intensitätsbewertungen

Zusammenstellung individueller Intensitätsbewertungen in Abhängigkeit der dargebotenen Verdünnungsstufen und unter Angabe der Prüferkürzel

Nr. Proband / Kürzel	Nr. Wdh.	Intensitätsbewertung für die dargebotenen Verdünnungsstufen										Null- lüfte	
		lg Z ₅₀₀	lg Z ₂₅₃	lg Z ₁₃₇	lg Z ₆₅	lg Z ₃₅	lg Z _{17,9}	lg Z ₉	lg Z _{4,8}			1	2
1 <i>MIF</i>	0	0	0	1	2	3	4	5	6			0	0
	1	0	0	1	1	3	4	6	5			0	0
	2	0	0	1	1	2	3	4	5			0	0
2 <i>ERF</i>	0	0	0	1	2	2	3	4	5			0	0
	1	0	0	2	3	3	4	5	5			0	0
	2	0	0	1	2	2	4	4	5			0	0
3 <i>GÖR</i>	0	1	1	1	2	3	4	5	6			0	0
	1	0	0	1	2	3	4	5	6			0	0
	2	0	1	0	2	3	3	4	5			0	0
4 <i>MOF</i>	0	0	0	0	2	2	3	5	5			0	0
	1	0	0	0	1	2	4	4	4			0	0
	2	0	0	1	1	2	4	4	5			0	0
5 <i>STB</i>	0	1	0	1	1	1	1	2	4			0	0
	1	0	0	1	1	0	2	3	5			0	0
	2	0	0	1	0	1	2	3	5			0	0
6 <i>DÖM</i>	0	0	0	1	1	3	3	4	5			0	0
	1	1	0	0	2	3	3	4	5			0	0
	2	0	0	2	1	3	2	4	5			0	0
7 <i>SCS</i>	0	1	0	0	1	2	4	5	5			0	0
	1	0	0	1	2	2	4	5	6			0	0
	2	1	0	1	1	2	3	5	4			0	0
8 <i>KOR</i>	0	0	0	1	1	2	4	5	5			0	0
	1	1	0	0	2	1	3	4	5			0	0
	2	0	0	0	2	2	3	4	5			0	0
9 <i>BEA</i>	0	0	0	0	1	2	3	3	4			0	0
	1	0	0	0	1	2	3	3	4			0	0
	2	1	0	0	2	2	3	4	4			0	0
10 <i>SCL</i>	0	1	1	1	2	3	4	5	6			0	0
	1	0	0	1	3	3	4	5	6			0	0
	2	1	0	2	1	2	4	5	6			0	0
11 <i>NAA</i>	0	0	0	1	1	3	4	5	6			0	0
	1	0	0	1	3	2	4	5	6			0	0
	2	0	0	2	1	3	4	6	6			0	0
12 <i>GRC</i>	0	0	0	1	1	2	3	4	5			0	0
	1	0	1	1	2	2	4	5	5			0	0
	2	0	0	1	1	2	3	4	6			0	0

A.1.19 Phenol

Tabelle 147: Phenol - Intensitätsbewertungen

Zusammenstellung individueller Intensitätsbewertungen in Abhängigkeit der dargebotenen Verdünnungsstufen und unter Angabe der Prüferkürzel

Nr. Proband / Kürzel	Nr. Wdh.	Intensitätsbewertung für die dargebotenen Verdünnungsstufen										Null- lüfte	
		lg Z ₀₃₄	lg Z ₉₉₉	lg Z ₅₀₀	lg Z ₂₅₃	lg Z ₁₃₇	lg Z ₆₅	lg Z ₃₅	lg Z _{17,9}	lg Z ₉		1	2
1 MOF	0	0	0	1	3	3	5	4	6	6		0	0
	1	0	0	0	1	3	3	4	5	5		0	0
	2	0	0	0	0	2	4	4	4	6		0	0
2 KOI	0	0	1	0	1	3	4	5	5	6		0	0
	1	0	1	0	0	3	4	4	5	6		0	0
	2	0	0	0	1	2	5	5	6	5		0	0
3 ADM	0	0	0	1	1	3	3	5	5	6		0	0
	1	0	0	0	0	1	3	4	5	5		0	0
	2	0	0	0	1	2	4	3	5	6		0	0
4 ADS	0	0	0	0	1	2	3	4	5	5		0	0
	1	0	0	0	0	1	3	3	4	5		0	0
	2	0	0	0	0	1	3	3	5	5		0	0
5 STB	0	0	0	0	1	3	3	5	6	6		0	0
	1	0	0	0	1	2	3	5	6	6		0	0
	2	0	0	0	2	3	4	5	6	6		0	0
6 ERF	0	0	0	1	2	4	3	4	5	5		0	0
	1	0	0	0	1	2	4	4	5	5		0	0
	2	0	0	0	0	4	3	5	5	5		0	0
7 MEC	0	0	0	1	3	4	5	6	6	6		0	0
	1	0	0	0	1	3	4	5	6	6		0	0
	2	0	0	0	0	2	4	6	6	6		0	0
8 KOR	0	0	1	2	1	3	4	4	5	6		0	0
	1	0	0	1	2	2	3	4	4	5		0	0
	2	0	0	1	2	3	2	4	5	5		0	0
9 SüM	0	0	0	1	1	3	3	4	5	6		0	0
	1	0	0	0	1	2	3	4	5	5		0	0
	2	0	0	0	1	2	3	4	4	6		0	0
10 SCL	0	1	1	0	2	3	3	5	6	6		0	0
	1	0	0	0	1	3	3	4	5	5		0	0
	2	0	0	0	0	2	3	3	5	5		0	0
11 SCO	0	0	1	1	2	3	3	4	4	4		0	0
	1	0	0	1	1	2	3	4	5	5		0	0
	2	0	0	0	1	2	3	3	4	5		0	0
12 GAL	0	0	1	0	1	2	3	4	5	5		0	0
	1	0	0	0	1	1	2	4	5	5		0	0
	2	0	0	0	0	1	2	3	3	5		0	0

A.1.20 2-Butanonoxim

Tabelle 148: 2-Butanonoxim – Intensitätsbewertungen

Zusammenstellung individueller Intensitätsbewertungen in Abhängigkeit der dargebotenen Verdünnungsstufen und unter Angabe der Prüferkürzel

Nr. Proband / Kürzel	Nr. Wdh.	Intensitätsbewertung für die dargebotenen Verdünnungsstufen								Null- lüfte	
		lg Z ₁₃₇	lg Z ₆₅	lg Z ₃₅	lg Z _{17,9}	lg Z ₉	lg Z _{4,8}			1	2
1 <i>SÜM</i>	0	0	0	0	0	2	3			0	0
	1	0	0	0	0	2	2			0	0
	2	0	0	0	0	1	2			0	0
2 <i>ERF</i>	0	0	0	1	2	2	4			0	0
	1	0	0	1	1	1	3			0	0
	2	0	0	0	1	2	3			0	0
3 <i>DOA</i>	0	0	1	0	2	2	4			0	0
	1	0	0	0	1	2	3			0	0
	2	0	0	1	1	1	2			0	0
4 <i>GAL</i>	0	1	0	1	3	2	5			0	0
	1	0	0	0	1	1	3			0	0
	2	0	0	1	1	2	4			0	0
5 <i>SHC</i>	0	1	0	1	3	3	5			0	0
	1	0	0	1	2	2	6			0	0
	2	0	0	1	3	4	4			0	0
6 <i>SHD</i>	0	1	1	1	2	3	4			0	0
	1	0	2	0	1	3	4			0	0
	2	0	0	0	2	3	4			0	0
7 <i>SCO</i>	0	1	0	0	2	3	5			0	0
	1	0	0	0	3	2	4			0	0
	2	0	0	0	2	3	5			0	0
8 <i>GöR</i>	0	1	1	2	3	3	4			0	0
	1	0	0	1	3	3	4			0	0
	2	0	1	1	3	3	4			0	0
9 <i>STB</i>	0	0	0	0	0	1	3			0	0
	1	0	0	0	1	1	2			0	0
	2	0	0	0	1	1	3			0	0
10 <i>KEH</i>	0	0	0	1	1	2	3			0	0
	1	0	0	0	1	1	2			0	0
	2	0	0	0	1	1	3			0	0
11 <i>MIF</i>	0	0	0	1	2	2	3			0	0
	1	0	0	1	2	2	3			0	0
	2	0	1	1	2	2	3			0	0
12 <i>PEC</i>	0	0	0	1	1	0	2			0	0
	1	1	0	0	1	1	2			0	0
	2	0	0	1	1	1	2			0	0