

Vaccinegate:

Studie über das Profil der chemischen Zusammensetzung von Gardasil 9



Kurze Darstellung der Ergebnisse

Mit der vorliegenden Analyse kommen wir zum vierten Impfstoff, der mit dieser Methode getestet wurde, mit dem Ziel, die chemisch-protective Zusammensetzung der analysierten Chargen zu überprüfen.

In diesem Fall haben wir uns auf einen Impfstoff konzentriert, der in Italien nicht verpflichtend ist, nämlich den gegen das humane Papillomavirus, der aber in der jüngsten Vergangenheit aufgrund zahlreicher Berichte über mutmaßliche unerwünschte Wirkungen viel zu reden gegeben hat. Die Anti-HPV-Impfstoffe haben immer eine intensive Debatte ausgelöst, auch außerhalb Italiens; daher haben wir beschlossen, unsere Arbeit auch auf dieses Produkt zu konzentrieren.

Hinweis: Gardasil 9 ist ein Anti-Hpv-Impfstoff, der laut Packungsbeilage 9 Antigene enthalten sollte, die vor 9 verschiedenen Subtypen des Hpv-Virus schützen (Subtyp 6 - 11 - 16 - 18 - 31 - 33 - 45 - 52 - 58). Es wurden jedoch nicht alle angegebenen Antigene nachgewiesen, sondern 7 von 9.

Bei dieser Charge von Gardasil 9 haben wir, wie bei den zuvor untersuchten Impfstoffen, festgestellt:

- **Chemische Verunreinigungen aus dem Herstellungsprozess oder Kreuzkontaminationen aus verschiedenen Produktionslinien**
- **Chemische Toxine**

ANTIGENE: Wie bereits erwähnt, soll Gardasil 9, wie in der Packungsbeilage angegeben, 9 Antigene gegen 9 verschiedene Subtypen des Hpv-Virus enthalten (Subtyp 6 - 11 - 16 - 18 - 31 - 33 - 45 - 52 - 58).

Von den oben genannten haben wir keine gefunden:

- **L1 Typ 11 Humanes Papillomavirus (einer der Subtypen, die am häufigsten mit Gebärmutterhalsläsionen in Verbindung gebracht werden)**
- **Humanes Papillomavirus L1 Typ 58 (einer der Subtypen, der am häufigsten mit Gebärmutterhalskrebs in Verbindung gebracht wird)**

Diese beiden Subtypen wurden mit der angewandten Analyseverfahren nicht erkannt (im Gegensatz zu den übrigen 7).

Auch in diesem Fall haben wir es also mit einem Produkt zu tun, das NICHT das zu enthalten scheint, was es enthalten sollte. Von den 9 Antigenen wurden nur 7 gefunden.

Dies wirft eine wichtige Frage bezüglich der Produktkonformität auf. Eine Frage, die nicht von uns zu lösen ist, und wie immer stellen wir die Frage denjenigen, die kompetent und verantwortlich sind.

Darüber hinaus wurden 338 Signale chemischer Verunreinigungen festgestellt, **von denen 22 % bekannt sind**. Auch diese Daten stehen im Einklang mit den früheren Ergebnissen. Unter diesen Signalen wurden auch 10 chemische Toxine identifiziert, die wahrscheinlich aus dem Herstellungsprozess der Antigene oder anderen Prozessen am Produktionsstandort des Impfstoffs stammen.

Zusammenfassend lässt sich sagen, dass selbst Gardasil 9 - wie auch die sechswertigen Hexyon und Infanrix Hexa und das vierwertige Priorix Tetra - im Hinblick auf die von uns in Auftrag gegebene Methode erhebliche Zweifel sowohl an seiner Wirksamkeit als auch an seiner Sicherheit aufkommen lassen.

Wie jedes andere pharmazeutische Produkt haben auch diese Medikamente schwerwiegende Nebenwirkungen und können verschiedene Arten von unerwünschten Wirkungen auslösen, die auch schwerwiegend sein können. Die Wirksamkeit des Impfstoffs in Frage zu stellen, weil ein oder mehrere Antigene im Vergleich zu den Angaben des Herstellers fehlen, muss denjenigen, die sich für eine Impfung entscheiden, bekannt sein (andernfalls würde dies ein betrügerisches Verhalten derjenigen darstellen, die den Impfstoff verkaufen und verabreichen); Aus diesem Grund ist es sehr wichtig, die wissenschaftliche Forschung über den Inhalt der Impfstoffe fortzusetzen, wobei zu berücksichtigen ist, dass der Hauptempfänger die pädiatrische Bevölkerung ist und die Personen, die die Impfstoffe erhalten, an keiner offensichtlichen Pathologie leiden, und dass die Institutionen selbst eine solche vorbeugende Prophylaxe unter Verwendung dieser Produkte als notwendig angeben. Die Einrichtungen sind daher direkt an der Bewertung des Sicherheitsprofils des Produkts und seiner Einhaltung beteiligt.



Studie über das Profil der chemischen Zusammensetzung von Gardasil 9

Einleitung und Beschreibung des Bedarfs

Die qualitativ-quantitative Analyse organischer Verbindungen ist im Bereich der Pharmakologie von großer Bedeutung¹, da sich aus den neuen Herstellungsverfahren für biologische Arzneimittel und den komplexen strukturellen und biologischen Eigenschaften dieser Produkte potenzielle Sicherheitsprobleme ergeben².

Die Überprüfung der Zulassungsdossiers für militärische Impfstoffe, die wir im Abschlussbericht³ der parlamentarischen Untersuchungskommission "Abgereichertes Uran"⁴ finden, ergab das Vorhandensein von proteinchemischen Verunreinigungen und Verunreinigungen, die weitere analytische Untersuchungen erfordern. Unser Verband hat beschlossen, diese Aufgabe so weit wie möglich zu übernehmen.

Dieses Projekt ist Teil der oben erwähnten Erkenntnisse. Es war daher notwendig, eine Technologie zu entwickeln, die in der Lage ist, ein breites Spektrum von Molekülen chemischen, metabolischen und proteinhaltigen Ursprungs zu analysieren, um die Qualität der erhaltenen Ergebnisse zu bewerten. IA-Methode wurde daher entwickelt, basierend auf SANIST⁵ -6 Technologie, um Impfstoffe auf Reinheit und Sicherheit zu testen (weitere Informationen unten).

Ergebnisse und Diskussion

1. Analyse der auf dem Beipackzettel des Impfstoffs angegebenen Zusammensetzung

Zusammenstellung	Vorläufigkeit	Ionische Spezies
Natriumchlorid	Nicht entdeckt	-
L-Histidin	ja	[M+H] ⁺
Polysorbat 80	Nicht entdeckt	-
Natriumborat	Nicht entdeckt	-
L1-Protein [Humanes Papillomavirus Typ 6]	ja	[M+nH] ⁿ⁺
L1-Protein [Humanes Papillomavirus Typ 11]	Nicht entdeckt	-
L1-Protein [Humanes Papillomavirus Typ 16]	ja	[M+nH] ⁿ⁺
L1-Protein [Humanes Papillomavirus Typ 18]	ja	[M+nH] ⁿ⁺
L1-Protein [Humanes Papillomavirus Typ 31]	ja	[M+nH] ⁿ⁺
L1-Protein [Humanes Papillomavirus Typ 33]	ja	[M+nH] ⁿ⁺
L1-Protein [Humanes Papillomavirus Typ 45]	ja	[M+nH] ⁿ⁺
L1-Protein [Humanes Papillomavirus Typ 52]	ja	[M+nH] ⁿ⁺
L1-Protein [Humanes Papillomavirus Typ 58]	Nicht entdeckt	-



¹ Lett Appl Microbiol. 2015 Feb;60(2):174-80. doi: 10.1111/lam.12355 (<https://www.ncbi.nlm.nih.gov/pubmed/25376111>)

² Fuchs F., Biochimie. 2002 Nov;84(11):1173-9 (<https://www.ncbi.nlm.nih.gov/pubmed/12595146>)

³ <http://www.camera.it/leg17/491?idLegislatura=17&categoria=022bis&tipologiaDoc=documento&numero=023&doc=pdf>

⁴ http://www.camera.it/leg17/436?shadow_organo_parlamentare=2588

⁵ Albini A. et al. Front Endocrinol (Lausanne). 2018 Apr 5;9:110.doi:10.3389/fendo.2018.00110. (<https://www.ncbi.nlm.nih.gov/pubmed/29674995>)



2. Analyse der Proteinfraction

Nach den Angaben des Herstellers enthält der Impfstoff Gardasil 9 einige Proteine. Die Probe wurde auf die Identifizierung dieser Proteine untersucht.

2.1 - 1°-Analyse: Bradford's Test

Um festzustellen, ob Proteine vorhanden waren, wurde der Impfstoff Gardasil 9 einem Bradford-Test unterzogen. 300 µl osmotisches H₂O wurden zu 200 µl des Impfstoffs hinzugefügt, um das entsprechende Volumen zu erreichen: 500 µl Bradford-Reagenz wurden dann zu der Lösung hinzugefügt. Nach der visuellen Analyse wurde das Vorhandensein von Proteinen oder Peptidsequenzen durch die Blaufärbung der Probe bestätigt.

Auf der Grundlage der zuvor ermittelten Kalibrierungskurve wurde die Konzentration der Proteine auf **0,062 mg/ml** geschätzt.

2.2 - 2a-Analyse: Verdauung wie sie ist

Nach dem Bradford-Assay wurde die Impfstoffprobe einem enzymatischen Aufschluss unterzogen. 10 µl der Rohprobe wurden mit 50 µl Trypsin behandelt und über Nacht in einem Thermoblock bei 37 °C gelagert. 1 mg / mL Hämoglobin-Kontrolle wurde vorbereitet und wie die Probe behandelt.

Das Vorhandensein von Proteinen in der Probe wurde mit dieser Analyse nachgewiesen.

2.3 - 3a Analyse: Aufschluss des Präzipitats

Die Impfstoffprobe wurde dann einer zweiten Analyse unterzogen, wobei die festen und die flüssigen Fraktionen durch Zentrifugation getrennt wurden. Nach der Zentrifugation wurde der gesamte Überstand abgenommen. Die verbleibende ausgefällte feste Fraktion wurde dann mit 30 µl Trypsin behandelt und über Nacht im Thermoblock bei 37°C belassen. Eine 1 mg/ml Hämoglobin-Kontrolle wurde hergestellt und nach demselben Verfahren wie die Impfstoffprobe behandelt. Nach dem Aufschluss wurden sowohl die Impfstoffprobe als auch die Kontrolle zentrifugiert. Der Überstand wurde extrahiert und zur Analyse in Fläschchen gefüllt. 20 µl osmotisches H₂ O wurden hinzugefügt, um ein ausreichendes Volumen für die Injektion zu erreichen.

Das Vorhandensein von Proteinen in der Probe wurde mit dieser Analyse nachgewiesen.

Bezeichnung	Molekulargewicht (KDa)	Ergebnis	Datenbank
Kette A, Hochauflösende Kryo-EM-Karten des humanen Papillomavirus 16 zeigen L2-Lokalisierung und Heparin-induzierte Konformationsänderungen	54	415/50	5KEP_A
Hauptkapsidprotein L1 [Humanes Papillomavirus Typ 33]	56	226/50	ACV84008.1
Kette A, Kristallstruktur des Hpv58-Pentamers im Komplex mit dem Fab-Fragment des Antikörpers A12a3	55	219/50	5Y9C_A
Hauptkapsidprotein L1 [Humanes Papillomavirus Typ 52]	59	175/50	ABU55765.1
L1-Kapsidprotein [Humanes Papillomavirus Typ 31]	56	139/50	AAA92894.1
Hauptkapsidprotein L1, teilweise [Humanes Papillomavirus Typ 16]	6	123/50	ADB97224.1
L1-Protein [Humanes Papillomavirus Typ 18]	64	94/50	AAP20601.1
L1 [Humanes Papillomavirus Typ 45]	57	69/50	AAV86494.1





Toxizitätsbewertung für die identifizierten Sequenzen

Es war nicht möglich, den molekularen Toxizitätsindex auf der Grundlage der identifizierten Peptidsequenzen zu bewerten.

Vorhandensein von freien Peptiden

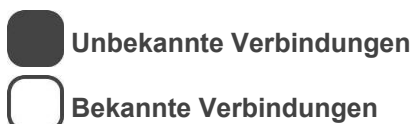
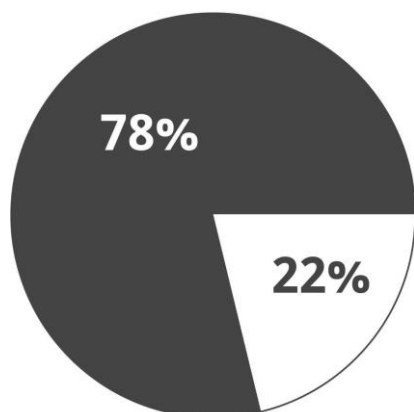
Es wurden keine freien Peptide nachgewiesen.

3. Analyse der metabolischen Fraktion

Es ist zu betonen, dass diese Screening-Studie halbquantitative Daten liefert, die einem Bereich **von Nanogramm bis Mikrogramm** als indikative Größenordnung entsprechen. Um genaue quantitative Daten zu erhalten, müssen zertifizierte analytische Standards mit bekannter Stärke verwendet werden.

Im Folgenden berichten wir über die Ergebnisse des Identifizierungsscreenings der beiden untersuchten Chargen:

Lotto #1 (R013092)



In Batch #1 haben wir 338 Signale identifiziert, von denen nur 22% bekannt waren



HINWEISE ZUM VERSTÄNDNIS: Dies ist eine Analyse der ersten Stufe, d. h. eine Identifizierung auf der Grundlage des Molekulargewichts. Wenn das Ergebnis eindeutig ist (d.h. bei einem gemessenen Molekulargewicht stimmt nur eine Verbindung überein), ist es wahrscheinlicher, dass es korrekt ist, aber absolute Sicherheit ist in dieser Phase nicht möglich. Wie Sie feststellen werden, können bei bestimmten Verbindungen verschiedene Substanzen demselben Molekulargewicht entsprechen. Daher sind weitere gezielte Analysen mit dem entsprechenden Standard erforderlich, um ihre Identität zu bestätigen.

3.1. Impfstoff Gardasil

Es wurden **338 Signale** festgestellt, von denen nur **22 %** eine mögliche Klassifizierung ergaben (**Tabelle 1**). Es ist hervorzuheben, dass der Anteil der Signale nicht genau mit dem Anteil der Verbindungen korreliert, da bei der Massenspektrometrie eine einzige Verbindung mehrere Massen/Ladungs-Verhältnisse (m/z) erzeugen kann.



Es muss darauf hingewiesen werden, dass die Identität der Verbindung nicht sicher ist und durch ein Screening der zweiten Stufe mit zertifizierten Analysestandards bestätigt werden sollte.

In der Tat misst das Gerät während des Screenings bestimmte Daten anhand ihres genauen Molekulargewichts (Messfehler <10 ppm). Die empirische Formel wird auf der Grundlage dieser Messungen berechnet. Einige Formeln können mehreren Verbindungen mit demselben Molekulargewicht, aber unterschiedlicher chemischer Identität entsprechen



HINWEISE ZUM VERSTÄNDNIS: Im Wesentlichen wurde festgestellt, dass es mehrere unbekannte Signale gibt, die in internationalen Datenbanken nicht identifiziert werden konnten.

Es wurden Moleküle recherchiert, die möglicherweise zur Kategorie der Toxine gehören. Sie wurden auf der Grundlage einer genauen m / z-Modus-Recherche (Fehler <10 ppm) unter Verwendung der Datenbank für toxische Verbindungen in der Metlin-Suchmaschine vorgeschlagen. **Tabelle 2** zeigt die gefundenen Kandidaten.

4. Fina-Betrachtung

Der Analytiker, der die beiden Partien untersuchte, stellte eine erhebliche Variabilität des Gehalts an Verunreinigungen fest. Die meisten dieser Verunreinigungen wurden nicht anhand der Stoffwechsel- und Protein-Referenzdatenbanken (KEGG, NCBI-Prot und SwissProt) charakterisiert.⁸⁻⁹ Ein kritisches Problem ist die Kontamination mit verschiedenen Verbindungen, die potenziell oder definitiv schädlich für die menschliche Gesundheit sind.

Kurz gesagt, die ersten Fragen, die wir uns gestellt haben, und die entsprechenden Antworten, die wir erhalten haben, sind die folgenden:

1. Sind die im Datenblatt aufgeführten chemischen Stoffe vorhanden?	Teilweise
2. Gibt es chemische Verunreinigungen?	Ja
3. Wie viele kontaminierende Verbindungen gibt es?	Über 70
4. Was sind sie möglicherweise?	Chemische Toxine, chemische Verbindungen

Nächste Analyse

1. die interessantesten wahrscheinlichen Verbindungen mit Gewissheit zu identifizieren
2. die genaue Menge jedes Schadstoffs zu bestimmen

5. Künftige Entwicklungen in der Forschung

Bestätigungs- und Identitätsanalysen werden mit der "**Tandem-Massenspektrometrie (MS / MS)**"-Technik in Verbindung mit zertifizierten analytischen Standards durchgeführt. Die Analysen werden in Übereinstimmung mit den europäischen Richtlinien (EU-Richtlinie 2002/657 / EC) durchgeführt, die für die Identifizierung von Verbindungen nützlich sind.²⁹

6. Beschreibung der SANIST-Technologie

Die international renommierte SANIST-Plattform wurde durch Veröffentlichungen in vorreferenzierten wissenschaftlichen Zeitschriften genutzt, um ein erstes Identifizierungsscreening des interessierten Impflings durchzuführen.



7. Angaben zur Analysemethode

Erste Überarbeitung 17.



Die SANIST-Technologie besteht aus:

- Kit für die Extraktion der Analyten (der zu bestimmenden unbekannten Substanzen);
- das Analysesystem LC-SACI / ESI-MS 6, das das chemische Rauschen von Massenspektrometern reduziert und eine bessere Detektion instrumenteller Signale ermöglicht;
- das Datenverarbeitungssystem SANIST ⁶⁻⁷, das aus einer lokalen und einer vernetzten Bioinformatikplattform besteht, die in der Lage ist, Daten mit Hilfe spezieller Datenbanken und maßgeschneiderter Algorithmen zu verarbeiten. In der Screening-Phase erfolgt die Identifizierung im Rahmen der wissenschaftlichen Forschung und durch Recherche in offiziellen Datenbanken (KEGG, NCBI-Prot und SwissProt) ^{8,9} ohne die Verwendung zertifizierter Analysestandards. Zur Bestätigung der Identität muss eine Analyse der zweiten Stufe mit zertifizierten Analysestandards durchgeführt werden.

8. Anwendungsbereiche der SANIST-Technologie

Bis heute ist die SANIST-Plattform in den folgenden Bereichen einsetzbar:

- In der **klinischen Forschung** über Krankheitsmarker und ihre direkte Anwendung im diagnostischen Bereich.
- Lebensmitteldienstleistungen**, Rückverfolgbarkeit von Lebensmitteln. Vergleichende Studien zur Bestimmung der Qualität von Produkten auf der Grundlage ihrer komplexen molekularen Zusammensetzung. Kontrolle von Lebensmittelfälschungen.
- Nutrazeutischer Sektor**, Entwicklung des Nährwerts eines Nahrungsergänzungsmittels auf der Grundlage seiner molekularen Zusammensetzung. Fälschungssuche (z.B.: Zusatzdrogen).
- Pharmazeutischer Sektor**, Arzneimittelkontrolle und Erforschung von aktiven Biomolekülen.
- Kosmetikindustrie**: Die molekulare Zusammensetzung von kosmetischen Produkten kann sorgfältig überwacht und mit der Qualität des Produkts in Verbindung gebracht werden.

9. Wie man die Tabellen liest

Dies ist eine Screening-Phase, in der das Gerät genaue Molekulargewichtsdaten misst (Messfehler <10 ppm). Auf der Grundlage dieser Messungen wird eine Summenformel berechnet. Einige Formeln können mehreren Verbindungen mit demselben Molekulargewicht, aber unterschiedlicher chemischer Identität entsprechen (siehe Tabelle 1)

Beispiel für eine einzelne assoziierte Komponente:

▪ (-)-Jasmonensäure	C ₁₂ H ₁₈ O ₃	211.1313019
---------------------	--	-------------

In diesem Beispiel entdeckte das Gerät ein Signal mit einem Molekulargewicht. Durch Einfügen der Bruttoformel in die Datenbanken war es möglich, eine wahrscheinliche Komponente zuzuordnen.

10. Vollständige Kontaminierungstabellen

⁶ Albini A. et al., Rapid Commun Mass Spectrum. 2015 Oct 15;29(19):1703-10. doi: 10.1002/rcm.7270. (<https://onlinelibrary.wiley.com/doi/full/10.1002/rcm.7270>)

⁷ Cristoni S. et al., J Mass Spectrom. 2017 Jan;52(1):16-21. doi:10.1002/jms.3895. (<https://www.ncbi.nlm.nih.gov/pubmed/27776380>)

⁸ Kanehisa M. et al. Nucleic Acids Res. 2017 Jan 4;45(D1):D353-D361. doi:10.1093/nar/gkw1092. (<https://www.ncbi.nlm.nih.gov/pmc/articles/PMC5210567/>)

⁹ Cristoni S. et al., Expert Rev Proteomics. 2004 Dec; 1(4):469-83. (<https://www.ncbi.nlm.nih.gov/pubmed/15966842>)

Translated by team



Tabelle1

In Frage kommende Verbindungen	Brachiale Formel	Verhältnis m/z
▪ (-)-Jasmonensäure	C12H18O3	211.1313019
▪ (10S)-Jugendhormon III diol	C16H28O4	285.2043152
▪ 16alpha,17alpha-Dihydroxyprogesteron-Acetophenid	C29H36O4	449.2609863
▪ 1-Palmitoyl-2-(5-keto-8-oxo-6-octenoyl)-sn-Glycero-3-phosphocholin	C32H58NO10P	648.3792725
▪ 2,5-Dichlor-4-oxohex-2-enedioat	C6H4Cl2O5	226.9511973
▪ 2,5-Dichlor-4-oxohex-2-enedioat	C6H4Cl2O5	226.9511795
▪ 2-Ethylhexylphthalat	C16H22O4	279.158844
▪ 3-Chlor-4-(Dichlormethyl)-5-Hydroxy-2(5H)-furanon	C5H3Cl3O3	216.9224243
▪ 4-Prenyldihydropsylvin	C19H22O2	283.1706238
▪ 5-O-Methyl-Myo-Inositol	C7H14O6	195.0874863
▪ 6-Keto-Prostaglandin F1alpha	C20H34O6	371.2367249
▪ 6-Mercaptopurin-Ribonukleosidtriphosphat	C10H15N4O13P3S	524.9658813
▪ Acetylintermedin	C17H27NO6	342.1893311
▪ Acetylspiramycin	C45H76N2O15	443.2720133
▪ all-trans-Hexaprenyl-Diphosphat	C30H52O7P2	587.3295288
▪ Aphidicolin	C20H34O4	339.2527161
▪ Astemizol	C28H31FN4O	459.2644653
▪ Auriculine	C31H45NO8	560.3268331
▪ Avadharidine	C36H51N3O10	343.6897583
▪ Benzo[b]fluoren	C17H12	217.1044159
▪ Brunfelsamidin	C5H7N3	110.0712204
▪ Canthiumin	C33H36N4O4	553.2880859
▪ Chivosazol F	C41H57NO8	692.405426
▪ Chloralhydrat	C2H3Cl3O2	164.9265976
▪ Colubrinosid	C50H78O19	492.2683563
▪ Cucurbitacin B	C32H46O8	559.3309937
▪ Dauricine	C38H44N2O6	625.3318481
▪ Fasoracetam	C10H16N2O2	197.1282654
▪ Formothion	C6H12NO4PS2	257.9989014
▪ Fumitremorgin A	C32H41N3O7	290.6576843
▪ Fusaproliferin	C27H40O5	445.2876994
▪ Grayanotoxin I	C22H36O7	413.2475128
▪ GTP-gamma-S	C10H16N5O13P3S	539.9771729
▪ Hexachlor-1,3-butadien	C4Cl6	258.8174744



▪ Hydrocortison-Cypionat	C29H42O6	487.2982686
▪ Istamycin C1	C19H37N5O6	432.2798767
▪ JSTX-3	C27H47N7O6	566.3640747
▪ Kolanone	C33H42O4	503.3056641
▪ Lasiocarpin	C21H33NO7	412.2279358
▪ Lasonolid A	C41H60O9	697.4401855
▪ Leurosin	C46H56N4O9	405.2019348
▪ L-Histidin	C6H9N3O2	156.0765839
▪ Lovastatinsäure	C24H38O6	423.2746124
▪ Melagatran	C22H31N5O4	430.2484894
▪ Methyllycaconitin	C37H50N2O10	683.3430176
▪ Mibefradil	C29H38FN3O3	496.3033905
▪ Mycinamicin IV	C37H61NO11	696.4367879
▪ Netilmicin	C21H41N5O7	476.3059031
▪ Oleoylglyceronphosphat	C21H39O7P	435.2471924
▪ Onnamid A	C39H63N5O12	794.454895
▪ Ophiobolin A	C25H36O4	401.2615814
▪ Pentachlorphenol	C6HCl5O	264.8521729
▪ Perfluorooctylsulfonylfluorid	C8F18O2S	502.9395752
▪ Platycodin A	C59H94O29	634.3006592
▪ Pleurostyline	C25H29N3O2	404.2324829
▪ Prednisolon-Tebutat	C27H38O6	459.2792511
▪ Probucol	C31H48O2S2	517.3231506
▪ Protoporphyrinogen IX	C34H40N4O4	569.3136597
▪ Repaglinid	C27H36N2O4	453.2725677
▪ Repaglinid	C27H36N2O4	453.2766724
▪ Resolvin D1	C22H32O5	377.2325999
▪ Rhodojaponin IV	C24H38O8	455.2614441
▪ RU-0211	C20H32F2O5	391.2341309
▪ Sulfuramid	C10H6F17NO2S	527.9948934
▪ Symlandine	C20H31NO6	382.2190247
▪ Taurocholat	C26H45NO7S	516.300827
▪ Tiadinil	C11H10ClN3OS	268.0276947
▪ Trichlorethanol	C2H3Cl3O	148.9350891
▪ Valinomycin	C54H90N6O18	556.3158875
▪ Valnemulin	C31H52N2O5S	565.3616435
▪ Violacen	C10H13BrCl4	352.8970642
▪ Westiellamid	C27H42N6O6	547.3314819
▪ Zineb	C4H6N2S4. Zn	274.8809814



Tabelle 2

Verhältnis m/z	Molekül*
157.0799179	C7H12N2S
173.0782318	C4H8N6O2 C6H11F3O2
178.0585175	C6H6F3N3 C4H3N9
195.1224823	C8H18O5
200.0403748	C5H13NO3S2
206.893631	C4H2Cl4O
208.8906708	C3H4Cl4Si
218.9194489	C4H10Se2 C6H4BrO2P C5H5Cl3OS
272.1782837	C13H25N3OS C15H26ClNO
278.1966248	C14H23N5O C13H27NO5

* Brachiale Formeln in Verbindung mit toxischen Kandidaten.

