

---

## Op weg naar één multi-elementbepaling binnen 3 minuten met Triple Quadropole ICP-MS ?

Kristof Tirez, Filip Beutels, Wilfried Brusten

Studie uitgevoerd in opdracht van DEPARTEMENT OMGEVING, Afdeling Gebiedsontwikkeling, Omgevingsplanning en -projecten (GOP)  
2019/SCT/R/1891

December 2018



---

**VITO NV**

Boeretang 200 - 2400 MOL - BELGIE  
Tel. + 32 14 33 55 11 - Fax + 32 14 33 55 99  
vito@vito.be - www.vito.be

BTW BE-0244.195.916 RPR (Turnhout)  
Bank 375-1117354-90 ING  
BE34 3751 1173 5490 - BBRUBEBB



## DANKWOORD

Dit rapport kwam tot stand in samenwerking met Johan Annys van de Vlaamse Milieumaatschappij. Voor de organisatie van de demonstraties wensen we Alain Desprez, Yolande Abdelnour, Maarten Van Brussel (Agilent) en Simon Lofthouse, Claudia Charko, Peter Hoskam, Leslie De Keyser (Thermo Fisher Scientific) te bedanken.

## SAMENVATTING

In 2017-2018 werd onderzoek uitgevoerd naar de conservering van Hg in waterige matrices. Deze aanpak opende de weg naar één kwantitatieve multi-element bepaling van alle milieu relevante elementen in één analyse. Dit wil zeggen dat het mogelijk zou moeten zijn om met slechts één bemonsteringsrecipiënt, één ontsluiting en één ICP-MS analyse alle elementen zoals voorzien in milieuwetgeving te bepalen. Dit is niet alleen een halvering van de huidige inspanningen, maar bovendien ook een kostenreductie gezien geen bijkomende afzonderlijke Hg analyser noodzakelijk is.

De introductie van een nieuwe generatie ICP-MS instrumenten (triple quadrupole ICP-MS) biedt in dit kader nieuwe mogelijkheden op het gebied van het verwijderen van spectrale interferenties. In combinatie met het gebruik van een automatisch (vb ESI prepFAST) online verdunnings systeem en/of een argon gas verdunnings systeem bij de monsterintroductie, zou dit instrument de mogelijkheid kunnen bieden om alle relevante matrix- en spoorelementen in één analyse voldoende gevoelig en kwantitatief te bepalen en dit op een grote diversiteit aan matrices. Sinds 2017 wordt deze nieuwe generatie ICP-MS aangeboden door 2 leveranciers (Agilent en Thermo Fisher Scientific).

In samenwerking met VMM en de applicatielaboratoria van Agilent en Thermo Fisher Scientific werd een haalbaarheidsstudie uitgevoerd op 25 afvalwaters en 25 oppervlaktewaters. Het doel van deze studie was de haalbaarheid te evalueren van de triple quadrupole ICP-MS voor de kwantitatieve multi-element bepaling van 68 elementen (+ rhodium als interne standaard) in waterige milieumonsters.

H																	He	
Li	Be											B	C	N	O	F	Ne	
Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar	
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr	
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe	
Cs	Ba	La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn	
Fr	Ra	Ac																
			Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu		
			Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr		

De triple quadrupole ICP-MS biedt voor een aantal elementen (bv. Cd, Hg, As, Se, S, Si) nog meer garanties naar het verwijderen van potentieel aanwezige interferenten in vergelijking met de huidige ICP-MS instrumenten aanwezig in de meeste milieulaboratoria.

In combinatie met het gebruik van een automatisch (vb ESI prepFAST) online verdunnings systeem en/of een argon gas verdunnings systeem bij de monsterintroductie, biedt dit instrument het potentieel om alle relevante matrix- en spoorelementen in één analyse voldoende gevoelig en kwantitatief te bepalen conform de prestatie-eisen opgenomen in WAC. Een randbemerking hierbij

is dat voor een aantal elementen (bv. Ag, Sb, Sn, Hg) eerder de stabiliteit/conservering een grotere invloed kan hebben op de juistheid van de resultaten dan de meting zelf.

De in dit rapport vermelde prestatiekenmerken zijn indicatief en bijkomende optimalisatie van de multi-element methode is noodzakelijk o.a. naar het gebruik van meerdere interne standaarden naast Rh (bv.  $^6\text{Li}$ , Ge, Sc, Ir). Ook de keuze van (reactie) gassen in combinatie met te bepalen elementen kan nog verder geoptimaliseerd worden. Er wordt verwacht dat na optimalisatie, het mogelijk moet zijn om ook voor de elementen Ag, As, Be, Cd, Co, Hg, Se, Tl, U en V te kunnen voldoen aan de  $\text{LOQ}_{\text{max}}$  waarde  $\leq 30\%$  van de normwaarde. In dit geval zou voor alle elementen in de huidige milieuwetgeving kunnen voldaan worden aan de eis dat de rapportagegrens maximaal 30 % van de normwaarde mag bedragen.

Naast de kwantitatieve multi-element bepaling van 68 elementen, blijken de meetcondities van TQ-ICP-MS instrumenten voldoende robuust voor het in routine uitvoeren van “high throughput” analyse.

## INHOUD

<b>Dankwoord</b>	<b>I</b>
<b>Samenvatting</b>	<b>II</b>
<b>Inhoud</b>	<b>IV</b>
<b>Lijst van tabellen</b>	<b>V</b>
<b>Lijst van figuren</b>	<b>VI</b>
<b>HOOFDSTUK 1. Inleiding</b>	<b>1</b>
<b>HOOFDSTUK 2. selectie van monsters en elementen</b>	<b>3</b>
2.1. <i>Selectie van de monsters</i>	3
2.1.1. Oppervlaktewater	3
2.1.2. afvalwater	4
2.2. <i>Digestiemethode</i>	4
2.3. <i>Selectie van de elementen</i>	4
<b>HOOFDSTUK 3. Triple quadrupole ICP-MS</b>	<b>9</b>
3.1. <i>Ontwikkeling Inductief gekoppeld plasma - massaspectrometrie</i>	9
3.2. <i>Principe triple quadrupole-technologie</i>	10
3.3. <i>Multi element methode ontwikkeling</i>	12
3.3.1. 8900 ICP-MS QQQ (Agilent)	12
3.3.2. iCAP TQ ICP-MS (Thermo Fisher Scientific)	12
3.3.3. weerhouden instellingen	13
<b>HOOFDSTUK 4. Bespreking Resultaten</b>	<b>15</b>
4.1. <i>Quality control en referentiematerialen</i>	15
4.2. <i>Multi-element bepaling oppervlakte- en afvalwater</i>	19
4.3. <i>Kritische elementen</i>	26
4.4. <i>Stabiliteit / robuustheid</i>	30
<b>HOOFDSTUK 5. Besluit</b>	<b>32</b>
<b>Literatuurlijst</b>	<b>33</b>
<b>Bijlage A: meetdata afval- en oppervlaktewater</b>	<b>34</b>

---

**LIJST VAN TABELLEN**

Tabel 1: Locatie oppervlaktewatermonsters	3
Tabel 2: Verschillende lijsten van te bepalen elementen.	5
Tabel 3: Overzicht concentratieniveaus van elementen in grond-, drink-, oppervlakte- en afvalwater in de Vlaamse milieuwetgeving.	7
Tabel 4 : Weerhouden isotopen en meetmode	13
Tabel 5: Terugvindingen en relatieve standaard deviatie (n=6) van het LCS OW en LCS AW controle monster bepaald met 8900 ICP-MS QQQ en iCAP TQ ICP-MS.	15
Tabel 6: Terugvindingen en relatieve standaard deviatie (n=6) van SRM 1640a en SPS-SW2 bepaald met iCAP TQ ICP-MS.	16
Tabel 7: Berekening van de LOQ oppervlaktewater op basis van de bepaling van het LOQ OW controle monster bepaald met 8900 ICP-MS QQQ en iCAP TQ ICP-MS (de geanalyseerde LOQ oplossingen zijn afkomstig van verschillende leveranciers, de door de leverancier opgegeven gehalten voor As en Sn in geval van ICP-MS QQQ zijn niet correct). De recovery werd berekend op basis van de LOQ OW concentratie.	18
Tabel 8: Berekening van de LOQ oppervlaktewater op basis van de bepaling van hetzelfde LOQ OW controle monster bepaald met 8900 ICP-MS QQQ (n = 3 ) en iCAP TQ ICP-MS (n = 6). De recovery werd berekend op basis van de LOQ OW concentratie.	18

## LIJST VAN FIGUREN

Figuur 1: Locatie staalnamepunten schepmonsters oppervlaktewater. _____	4
Figuur 2 : Periodiek systeem der elementen/ lijst prioritaire stoffen _____	6
Figuur 3 : Periodiek systeem der elementen/ lijst milieu monitoring _____	6
Figuur 4 : Periodiek systeem der elementen/ lijst NBN EN ISO 17294:2016 _____	6
Figuur 5: Principe triple quadropole technologie,vb. Ti reactie NH <sub>3</sub> (Thermo Fisher Scientific) ____	11
Figuur 6 : Voorbeeld van reactie set-up voor de bepaling van zwavel gebruik makend van O <sub>2</sub> reactie (Agilent). _____	11
Figuur 7 : Massa spectrum van oppervlaktewater 1 , van Lithium (6 amu) tot Uranium (238 amu), geanalyseerd met 8900 ICP-MS QQQ en iCAP TQ ICP-MS. _____	20
Figuur 8 : Massa spectrum van afvalwater 2, van Lithium (6 amu) tot Uranium (238 amu), geanalyseerd met 8900 ICP-MS QQQ en iCAP TQ ICP-MS. _____	20
Figuur 9: Box and Whisker plot per element van ratio concentratie bepaald met 8900 ICP-MS QQQ versus iCAP TQ ICP-MS in 25 oppervlaktewaters. _____	21
Figuur 10: Box and Whisker plot per element van ratio concentratie bepaald met 8900 ICP-MS QQQ versus iCAP TQ ICP-MS in 25 oppervlaktewaters. _____	21
Figuur 11: Box and Whisker plot per element van ratio concentratie bepaald met 8900 ICP-MS QQQ versus iCAP TQ ICP-MS in 25 oppervlaktewaters. _____	22
Figuur 12: Box and Whisker plot per element van ratio concentratie bepaald met 8900 ICP-MS QQQ versus iCAP TQ ICP-MS in 25 oppervlaktewaters. _____	22
Figuur 13: Box and Whisker plot per element van ratio concentratie bepaald met 8900 ICP-MS QQQ versus iCAP TQ ICP-MS in 25 afvalwaters. _____	23
Figuur 14: Box and Whisker plot per element van ratio concentratie bepaald met 8900 ICP-MS QQQ versus iCAP TQ ICP-MS in 25 afvalwaters. _____	24
Figuur 15: Box and Whisker plot per element van ratio concentratie bepaald met 8900 ICP-MS QQQ versus iCAP TQ ICP-MS in 25 afvalwaters. _____	24
Figuur 16: Box and Whisker plot per element van ratio concentratie bepaald met 8900 ICP-MS QQQ versus iCAP TQ ICP-MS in 25 afvalwaters. _____	25
Figuur 17 : Vergelijking van meetresultaten voor As (µg/l) in 25 oppervlakte- en 25 afvalwaters met 8900 ICP-MS QQQ versus iCAP TQ ICP-MS (rode lijn is normwaarde Vlaamse wetgeving). __	26
Figuur 18 : Vergelijking van meetresultaten voor Be (µg/l) in 25 oppervlakte- en 25 afvalwaters met 8900 ICP-MS QQQ versus iCAP TQ ICP-MS (rode lijn is normwaarde Vlaamse wetgeving). __	27
Figuur 19 : Vergelijking van meetresultaten voor Cd (µg/l) in 25 oppervlakte- en 25 afvalwaters met 8900 ICP-MS QQQ versus iCAP TQ ICP-MS (rode lijn is normwaarde Vlaamse wetgeving). __	27
Figuur 20 : Vergelijking van meetresultaten voor Co (µg/l) in 25 oppervlakte- en 25 afvalwaters met 8900 ICP-MS QQQ versus iCAP TQ ICP-MS (rode lijn is normwaarde Vlaamse wetgeving). __	27
Figuur 21 : Vergelijking van meetresultaten voor Hg (µg/l) in 25 oppervlakte- en 25 afvalwaters met 8900 ICP-MS QQQ versus iCAP TQ ICP-MS (rode lijn is normwaarde Vlaamse wetgeving). __	28
Figuur 22 : Vergelijking van meetresultaten voor Se (µg/l) in 25 oppervlakte- en 25 afvalwaters met 8900 ICP-MS QQQ versus iCAP TQ ICP-MS (rode lijn is normwaarde Vlaamse wetgeving). __	28
Figuur 23 : Vergelijking van meetresultaten voor Tl (µg/l) in 25 oppervlakte- en 25 afvalwaters met 8900 ICP-MS QQQ versus iCAP TQ ICP-MS (rode lijn is normwaarde Vlaamse wetgeving). __	28
Figuur 24 : Vergelijking van meetresultaten voor U (µg/l) in 25 oppervlakte- en 25 afvalwaters met 8900 ICP-MS QQQ versus iCAP TQ ICP-MS (rode lijn is normwaarde Vlaamse wetgeving). __	29
Figuur 25 : Vergelijking van meetresultaten voor V (µg/l) in 25 oppervlakte- en 25 afvalwaters met 8900 ICP-MS QQQ versus iCAP TQ ICP-MS (rode lijn is normwaarde Vlaamse wetgeving). __	29
Figuur 26 : Vergelijking van meetresultaten voor Ag (µg/l) in 25 oppervlakte- en 25 afvalwaters met 8900 ICP-MS QQQ versus iCAP TQ ICP-MS (rode lijn is normwaarde Vlaamse wetgeving). __	29



- 
- Figuur 27: ICP-QQQ-MS stabiliteit signaal interne standaard (digestie oplossing werd 5 \* verdund gemeten, totale verdunning = 10) gedurende de meetreeks (ca. 110 analyses). De rode stippellijn omvat het criterium voor terugvinding van interne standaard (+/- 30 %). \_\_\_\_\_ 30
- Figuur 28: ICP-QQQ-MS stabiliteit signaal interne standaard in HMI-4 mode gedurende de meetreeks. De rode stippellijn omvat het criterium voor terugvinding van interne standaard (+/- 30 %). \_\_\_\_\_ 30
- Figuur 29: iCAP TQ ICP-MS stabiliteit signaal interne standaard (digestie oplossing werd 5 \* verdund gemeten, totale verdunning = 10) gedurende de meetreeks (ca. 130 analyses). De rode stippellijn omvat het criterium voor terugvinding van interne standaard (+/- 30 %). \_\_\_\_\_ 31



## HOOFDSTUK 1. INLEIDING

---

De nefaste gezondheidseffecten van verhoogde concentraties aan zware metalen (elementen) in de verschillende milieucompartmenten is genoegzaam bekend. Bijgevolg is monitoring van het gehalte aan elementen in de verschillende milieucompartmenten één van de meest uitgevoerde analyses in het kader van de milieuwetgeving.

In 2017-2018 werd onderzoek uitgevoerd naar de conservering van Hg in waterige matrices. Deze aanpak opende de weg naar één kwantitatieve multi-element bepaling van alle milieu relevante elementen in één analyse. Dit wil zeggen dat het mogelijk zou moeten zijn om met slechts één bemonsteringsrecipiënt, één ontsluiting en één ICP-MS analyse alle elementen zoals voorzien in milieuwetgeving te bepalen. Dit is niet alleen een halvering van de huidige inspanningen, maar bovendien ook een kostenreductie gezien geen bijkomende afzonderlijke Hg analyser noodzakelijk is.

In 2017 werd ook een eerste evaluatie uitgevoerd van screeningsmogelijkheden met ICP-MS. Hierbij werd vastgesteld dat de ICP-MS screeningsmethode een goede eerste indicatie kan geven over het al dan niet overschrijden van het indelingscriterium gevaarlijke stoffen (GS) en dit voor de 23 elementen gedefinieerd in VLAREM II Bijlage 2.3.1.

Bij de analyse van 5 monsters (2 oppervlaktewaters en 3 afvalwaters) werden overschrijdingen van het indelingscriterium gevaarlijke stoffen vastgesteld voor B, Zn, Tl, Se, Co, Cd, Ag, As, Ni, U, Mo, Tl, V en Ba. Bijkomend werden in beide oppervlaktewaters significant verhoogde gehalten aan Re en W vastgesteld (waarvoor geen indelingscriterium gevaarlijk stoffen gedefinieerd zijn). Een belangrijke opmerking in deze studie was wel (1) dat de kwaliteit van de resultaten afhangt van het type ICP-MS instrument, (2) instrument optimalisatie nodig is om poly-atomische interferenties voldoende te ondervangen.

De introductie van een nieuwe generatie ICP-MS instrumenten (triple quadrupole ICP-MS) biedt in dit kader nieuwe mogelijkheden op het gebied van het verwijderen van spectrale interferenties. In combinatie met het gebruik van een automatisch (vb ESI prepFAST) online verdunnings systeem en/of een argon gas verdunnings systeem bij de monsterintroductie, zou dit instrument de mogelijkheid kunnen bieden om alle relevante matrix- en spoorelementen in één analyse voldoende gevoelig en kwantitatief te bepalen en dit op een grote diversiteit aan matrices. Sinds 2017 wordt deze nieuwe generatie ICP-MS aangeboden door 2 leveranciers (Agilent en Thermo Fisher Scientific). In samenwerking met de applicatielaboratoria van deze leveranciers werd een haalbaarheidsstudie uitgevoerd naar inzetbaarheid van deze instrumenten in het kader van milieuanalyses.

De methode zou (minimaal) volgende elementen moeten omvatten: aluminium, antimoon, arseen, barium, beryllium, boor, cadmium, calcium, cerium, chroom, fosfor, ijzer, kalium, kobalt, koper, kwik, lood, magnesium, mangaan, molybdeen, natrium, nikkel, seleen, tellurium, thallium, tin, titanium, uranium, vanadium, zilver, zink en zwavel.

De resultaten van deze studie zijn terug te vinden in dit rapport



## HOOFDSTUK 2. SELECTIE VAN MONSTERS EN ELEMENTEN

### 2.1. SELECTIE VAN DE MONSTERS

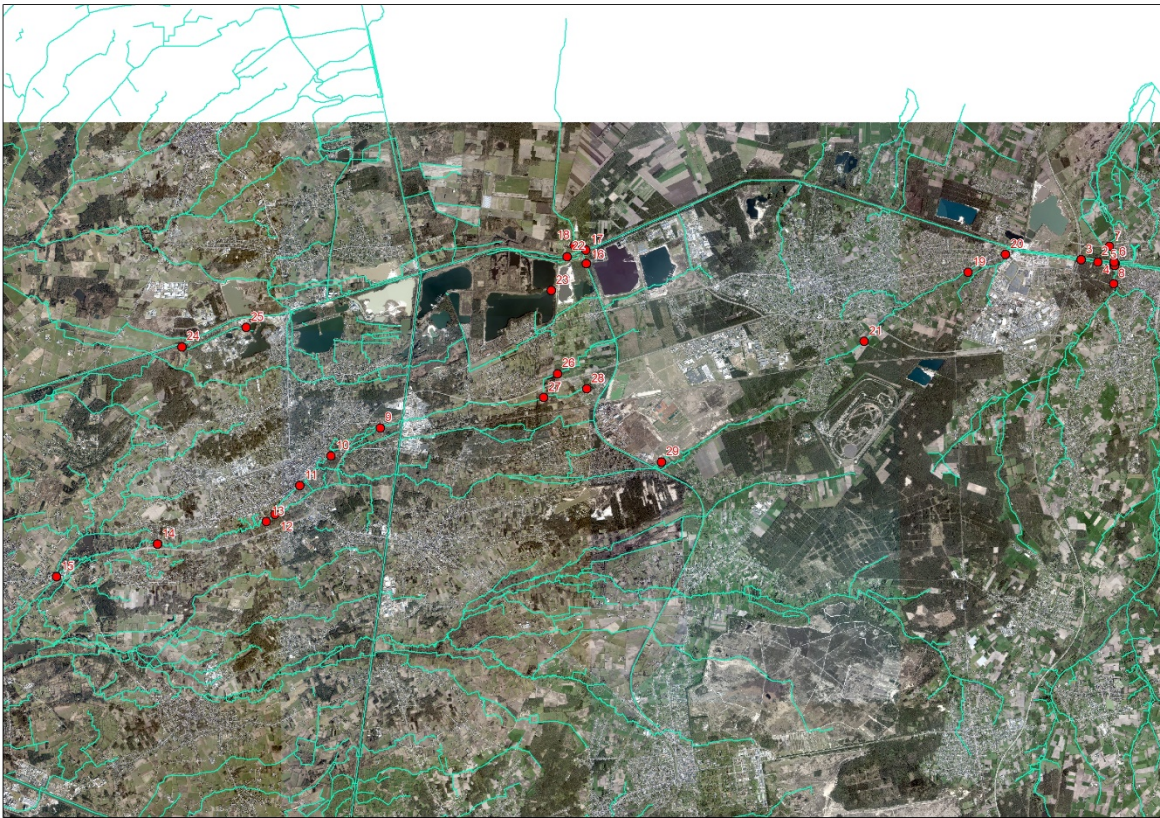
Door VITO werden 25 oppervlaktewaters bemonsterd, door VMM werden 25 afvalwaters bemonsterd.

#### 2.1.1. OPPERVLAKTEWATER

Op 28 mei 2018 werden 25 schepstalen bemonsterd door VITO op volgende locaties (zie Tabel 1 en Figuur 1).

*Tabel 1: Locatie oppervlaktewatermonsters (de kolom Fig1.verwijst naar de locaties op figuur1)*

Vito Code		Fig 1	Locatie	X coor	Y coor
180530-0036	OW1	1	Eindergatloop, vlak voor Dommel	223534,5	214347,3
180530-0037	OW2	2	Eindergatloop, halverwege brug en Dommel	223113,5	214400,1
180530-0038	OW3	3	Eindergatloop, thv brug achter zandvang	222680,1	214461,7
180530-0039	OW4	4	Dommel na eindergatloop	223556,7	214356,4
180530-0040	OW5	5	Dommel voor Eindergatloop	223551	214316,1
180530-0041	OW6	6	Kanaal Herentals-Bocholt, thv Dommel	223539,7	214398,6
180530-0042	OW7	7	Dommel 500m na Eindergatloop	223410,3	214805,4
180530-0043	OW8	8	Dommel 500m voor Eindergatloop	223524,6	213835,6
180530-0044	OW9	9	Scheppelijke Nete	204550,8	210114,7
180530-0045	OW10	10	Scheppelijke Nete	203284,5	209393,2
180530-0046	OW11	11	Molse Nete	202478,1	208624,2
180530-0048	OW12	13	Molse Nete	201608,8	207695,9
180530-0049	OW13	14	Molse Nete	198792,5	207110,4
180530-0050	OW14	15	Molse Nete	196172,6	206264,6
180530-0051	OW15	16	Kanaal naar Beverlo	209886,1	214363,8
180530-0052	OW16	17	Kanaal Herentals-Bocholt, voor kanaal naar Beverlo	209869,6	214711,2
180530-0053	OW17	18	Postelvaartje	209578,2	214824,1
180530-0055	OW18	20	Eindergatloop	220730,3	214593,6
180530-0056	OW19	21	Eindergatloop	217075	212350,5
180530-0057	OW20	22	Kanaal Herentals-Bocholt, na kanaal naar Beverlo	209390,2	214538,2
180530-0058	OW21	23	Vijver thv Kristalijn	208977,8	213663,6
180530-0059	OW22	24	Congovaart thv TAP	199424,7	212208,6
180530-0060	OW23	25	Grote laguna thv HAL 196	201083,2	212709,4
180530-0061	OW24	26	Scheppelijke Nete	209133,9	211515,3
180530-0063	OW25	28	Onbenoemde waterloop	209897,5	211128,6



*Figuur 1: Locatie staalnamepunten schepmonsters oppervlaktewater.*

### 2.1.2. AFVALWATER

Er werden 25 afvalwatermonsters geselecteerd door VMM.

### 2.2. DIGESTIEMETHODE

Alle 50 monsters werden gedestruerd conform NBN-EN-ISO 15587-1. Dit wil zeggen dat aan 25 ml monster, 6 ml HCl + 2 ml HNO<sub>3</sub> wordt toegevoegd, vervolgens gedestruerd bij 105°C gedurende 2 uur. Na afkoelen worden de monsters aangelengd tot 50 ml met ultra puur water.

### 2.3. SELECTIE VAN DE ELEMENTEN

De lijst van te bepalen elementen is in Tabel 2, Figuur 2, Figuur 3 en Figuur 4 samengevat, deze bevat volgende 3 subcategorieën:

- NBN EN ISO 17294:2016 "Water - Toepassing van massaspectrometrie met inductief gekoppeld plasma - Deel 2: Bepaling van geselecteerde elementen inclusief uranium isotopen" : 63 elementen zijn opgenomen in deze standaard methode
- Monitoring : 33 elementen die momenteel gemonitord worden in het kader van Vlaamse milieu monitoring (zie ook Tabel 3).
- lijst van prioritaire stoffen : 23 elementen waarvoor een indelingscriterium gevaarlijke stof (GS) is gedefinieerd in de Vlaamse milieuwetgeving. Het indelingscriterium gevaarlijk stoffen (GS) bepaalt vanaf welke concentratie een afvalwater beschouwd moet worden als

“bedrijfsafvalwater met gevaarlijke stoffen”. Indien de concentratie van gevaarlijke stoffen hoger is dan het indelingscriterium GS kan een milieuvergunning met emissiegrenswaarden gegeven worden per sector. In VLAREM II Bijlage 2.3.1. (Basismilieukwaliteitsnormen voor oppervlaktewater) zijn voor 23 elementen een Indelingscriterium GS gedefinieerd.

Tabel 2: Verschillende lijsten van te bepalen elementen.

Element	EN ISO 17294	Monitoring	Prioritaire stof IGS (µg/l)	Element	EN ISO 17294	Monitoring	Prioritaire stof IGS (µg/l)
Ag	x	x	0,4	Nb			
Al	x	x		Nd	x		
As	x	x	5	Ni	x	x	30
Au	x			Os			
B	x	x	700	P	x	x	1000
Ba	x	x	70	Pb	x	x	50
Be	x	x	0,1	Pd	x		
Bi	x			Pr	x		
Ca	x	x		Pt	x		
Cd	x	x	0,8	Rb	x		
Ce	x			Re	x		
Co	x	x	0,6	Rh	x		
Cr	x	x	50	Ru	x		
Cs	x			S		x	
Cu	x	x	50	Sb	x	x	100
Dy	x			Sc	x		
Er	x			Se	x	x	3
Eu				Si		x	
Fe	x	x		Sm	x		
Ga	x			Sn	x	x	40
Gd	x			Sr	x		
Ge	x			Ta			
Hf	x			Tb	x		
Hg	x	x	0,3	Te	x	x	100
Ho	x			Th	x		
In	x			Ti		x	100
Ir	x			Tl	x	x	0,2
K	x	x		Tm	x		
La	x			U	x	x	1
Li	x	x		V	x	x	5
Lu	x			W	x		
Mg	x	x		Y	x		
Mn	x	x		Yb	x		
Mo	x	x	350	Zn	x	x	200
Na	x	x		Zr	x		

Deze 3 lijsten zijn eveneens visueel weergegeven in onderstaande periodiek systeem der elementen.

H																			He
Li	Be											B	C	N	O	F		Ne	
Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar		
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr		
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe		
Cs	Ba	La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn		
Fr	Ra	Ac																	
			Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu			
			Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr			

Figuur 2 : Periodiek systeem der elementen/ lijst prioritaire stoffen

H																			He
Li	Be											B	C	N	O	F		Ne	
Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar		
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr		
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe		
Cs	Ba	La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn		
Fr	Ra	Ac																	
			Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu			
			Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr			

Figuur 3 : Periodiek systeem der elementen/ lijst milieu monitoring

H																			He
Li	Be											B	C	N	O	F		Ne	
Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar		
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr		
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe		
Cs	Ba	La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn		
Fr	Ra	Ac																	
			Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu			
			Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr			

Figuur 4 : Periodiek systeem der elementen/ lijst NBN EN ISO 17294:2016



In Tabel 3 wordt een overzicht gegeven van concentratieniveaus van elementen in grond-, drink-, oppervlakte- en afvalwater zoals opgenomen in de Vlaamse milieuwetgeving. Als criterium voor de maximale Limit of Quantification ( $LOQ_{max}$ ) wordt momenteel 30 % van de normwaarde gehanteerd. In deze gevallen waarvoor geldt dat de  $LOQ_{max}$  waarde  $\leq 30\%$  van de normwaarde, is de  $LOQ_{max}$  in het groen weergegeven. In deze gevallen waarvoor geldt dat de  $LOQ_{max}$  waarde  $\geq 30\%$  van de normwaarde, is de  $LOQ_{max}$  in het rood weergegeven.

Tabel 3: Overzicht concentratieniveaus van elementen in grond-, drink-, oppervlakte- en afvalwater in de Vlaamse milieuwetgeving.

		AW	OW				GW					DW		
		A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	
aluminium	µg/l	100				200	<u>60</u>		20	20	200	30	60	
antimoon	µg/l	30	100	30	30	<u>10</u>			3	3	5	30	1.5	
arseen	µg/l	5	5	1.5	2.5	20	6	<u>10</u>	3	3	10	30	3	
barium	µg/l	21	70	21	21	<u>1000</u>			300	300				
beryllium	µg/l	1	0.1	0.03	0.5									
boor	µg/l	210	700	210	210	<u>1000</u>	39		300	300	1000	30	300	
cadmium	µg/l	0.8	0.8	0.24	0.4	5		<u>2.5</u>	0.75	0.75	5	30	1.5	
cerium	µg/l	100												
chromium	µg/l	15	50	15	15	<u>50</u>	12		15	15	50	30	15	
fosfor	µg/l	300	140	42	-									
ijzer	µg/l	100				<u>20000</u>	1100		6000	6000	200	30	60	
kobalt	µg/l	0.6	0.6	0.18	0.3	-	-	-		0.3				
koper	µg/l	15	50	15	15	<u>100</u>	5		30	30	2000	30	600	
kwik	µg/l	0.15	0.3	0.09	0.15	<u>1</u>			0.3	0.3	1	30	0.3	
lood	µg/l	15	50	15	15	20		<u>10</u>	3	3	10	30	3	
mangaan	µg/l	20				<u>1000</u>	70		300	300	50	30	15	
molybdeen	µg/l	105	350	105	105									
nikkel	µg/l	9	30	9	9	40	6	<u>20</u>	6	6	20	30	6	
seleen	µg/l	5	3	0.9	3	<u>10</u>			3	3	10	30	3	
tellurium	µg/l	30	100	30	30									
thallium	µg/l	1	0.2	0.06	0.5									
tin	µg/l	12	40	12	12									
titanium	µg/l	30	100	30	30									
uranium	µg/l	0.5	1	0.3	0.3									
vanadium	µg/l	5	5	1.5	2.5									
zilver	µg/l	1	0.4	0.12	0.4									
zink	µg/l	60	200	60	60	500	17	<u>260</u>	78	78				
calcium	mg/l					270	<u>51</u>		15	15				
magnesium	mg/l					50	<u>8.3</u>		2.5	2.5				
natrium	mg/l					150	<u>18</u>		6	6	200	30	60	
kalium	mg/l					12	<u>4.1</u>	8	1.2	1.2				
sulfaat	mg/l SO <sub>4</sub>	25			4,5	250	<u>51</u>	150	15	15	250	30	75	
fosfaat	mg/l PO <sub>4</sub>	0,15				1.34	0.31	<u>0.83</u>	0.25	0.25				

- A : Rapportagegrens, Vlarem II, Bijlage 4.2.5.2, LOQ<sub>max</sub> afvalwater (WAC/VI/A/001 Prestatiekenmerken, versie 11/2018).
- B : Vlarem II, Bijlage 2.3.1, art 3
- C : 30% van de normwaarde (cfr 2009/90/EC)
- D : LOQ<sub>max</sub> oppervlaktewater (WAC/VI/A/001 Prestatiekenmerken, versie 11/2018)
- E : Vlarem II, Bijlage 2.4.1, milieukwaliteitsnorm
- F : Vlarem II Bijlage 2.4.1, minimale achtergrondwaarde
- G : Vlarem II Bijlage 2.4.1, minimale drempelwaarde
- H : 30% van de normwaarde (cfr 2009/90/EC)
- I : LOQ<sub>max</sub> grondwater (WAC/VI/A/001 Prestatiekenmerken, versie 11/2018), de onderliggende normwaarden (MKN, AGW, DW) zijn weerhouden voor het berekenen van de 30% normwaarde.
- J : Drinkwater richtlijn normwaarde
- K : Eis LOQ uitgedrukt als % van normwaarde
- L : LOQ<sub>max</sub> drinkwater (WAC/VI/A/001 Prestatiekenmerken, versie 11/2018)

---

## HOOFDSTUK 3. TRIPLE QUADRUPOLE ICP-MS

---

### 3.1. ONTWIKKELING INDUCTIEF GEKOPPELD PLASMA - MASSASPECTROMETRIE<sup>1</sup>

Inductief gekoppeld plasma - massaspectrometrie (ICP-MS) is een van de krachtigste technieken voor de bepaling van de concentratie en isotopische samenstelling van veel elementen in de meest uiteenlopende matrices. Sinds de commerciële introductie in 1983 was men zich echter ook bewust van de nadelen van ICP-MS, waarbij het voorkomen van spectrale overlapping de belangrijkste was. Door de jaren heen zijn zowel door academici als door fabrikanten inspanningen geleverd, die geleid hebben tot de ontwikkeling van verschillende benaderingen die het mogelijk maken om deze spectrale interferenties te elimineren (of op zijn minst te verkleinen). Helaas kan geen van deze benaderingen worden beschouwd als universeel toepasbaar voor interferentie-vrije analyse door middel van ICP-MS. Hieronder wordt een kort overzicht gegeven van de verschillende - momenteel commercieel bestaande - opties om de spectrale overlap te behandelen.

Volgende opties zijn sinds de beginjaren gebruikt om om te gaan met spectrale interferentie: analyt / matrixscheiding, wiskundige vergelijkingen en alternatieve benaderingen voor het inbrengen van monsters (bv. hydride) en dit ondanks de bijbehorende nadelen, zoals bijvoorbeeld lagere monsterdoorvoer, extra arbeidsintensiviteit, verlies van multi-elementvermogens en/of hogere mate van onzekerheid bij de meetresultaten.

De introductie van koele plasma-omstandigheden, waardoor de signalen voor alle Ar-bevattende ionen sterk zijn verminderd, was een eerste stap naar een meer algemene strategie, hoewel deze aanpak ook werd gekenmerkt door belangrijke beperkingen, zoals een verminderde elementdekking (slechte ionisatie efficiëntie voor elementen met een hogere ionisatie-energie), sterkere matrixeffecten en een verhoogde aanwezigheid van andere soorten storende ionen (bijv. oxide-ionen).

Waarschijnlijk moet de introductie van ICP-MS (SF-ICP-MS) met hoge resolutie als een cruciale doorbraak worden beschouwd. Een toename van de massa-resolutie gaat echter gepaard met een aanzienlijke daling van de efficiëntie van de ionenoverdracht, en dus van de gevoeligheid (1-2 orde-groottes), terwijl ook een fractie van de interferenties (bijv. overlapping van de signalen van isobare nucliden) niet kan overwonnen worden gebruik te maken van de hoge resolutie modus. Bovendien is SF-ICP-MS (ca. factor 3 à 4) duurder dan een op quadrupole gebaseerde ICP-MS (ICP-QMS).

In 1997 begonnen fabrikanten quadrupole-gebaseerde ICP-MS (ICP-QMS)-instrumenten uit te rusten met een collision-reaction cell (CRC)-systeem. De introductie van CRC's in ICP-QMS-instrumentatie (ICP-CRC-QMS) maakte verschillende benaderingen mogelijk om spectrale overlap te voorkomen door middel van controle over de botsingen en reacties die plaatsvonden in de cel, waardoor de selectiviteit van de techniek werd verbeterd. Op deze manier kunnen analyt en storende ionen met dezelfde (nominale) massa-naar-lading ( $m/z$ ) verhouding van elkaar worden gescheiden via gasfase-

---

<sup>1</sup> Method development for ultra-trace elemental and isotopic analysis using tandem ICP – mass spectrometry (ICP-MS/MS), Eduardo Bolea Fernández, Thesis submitted in fulfillment of the requirements for the degree of Doctor of Science: Chemistry, Department of Analytical Chemistry Research group : Atomic & Mass Spectrometry, Ghent University, 2017.

ion-molecuulprocessen. Niet-reactieve gassen (bijvoorbeeld He) in combinatie met kinetische energiediscriminatie (KED) kunnen worden gebruikt om de interferenties geproduceerd door polyatomaire ionen te verminderen. Die ionen vertonen een grotere botsingsdwarsdoorsnede dan atomaire ionen met dezelfde massa, dus botsen ze vaker en verliezen meer energie dan de analyt-ionen, zodat ze selectief de toegang tot de MS-sectie worden ontzegd. Echter, om dit proces efficiënt te laten zijn, zijn de omstandigheden zodanig dat ook een grote fractie van analyt-ionen wordt verwijderd, en dit vermindert de gevoeligheid.

Met een chemische resolutie op basis van selectieve ion-molecuulreacties kan spectrale overlap van zowel atomaire als moleculair storende ionen met dezelfde  $m/z$  als die van het overeenkomstige analyt-ion worden geadresseerd. Het gas reageert ofwel met de storende ionen, waardoor het doelelement kan worden gemeten met de oorspronkelijke  $m/z$  (on-massa), of met het analyt ion, resulterend in een nieuw reactieproduct ion dat interferentievrij kan worden gemeten op een ander  $m/z$  (massa-shift). Selectie van het meest geschikte reactiegas is cruciaal, waarbij er rekening mee moet worden gehouden dat hoe reactiever het gas is, hoe hoger de efficiëntie van de reactie en dus de verwachte gevoeligheid, maar ook hoe groter de mogelijkheid van het creëren van nieuwe spectrale interferenties, die voortkomen uit ionen die worden gevormd via reacties tussen het reactiegas en de bijbehorende matrixelementen. Voor conventionele ICP-CRC-QMS-instrumenten heeft de relatief slechte controle over de reactiecelchemie in de context van massa-verschuivingsbenaderingen gewoonlijk toepassingen beperkt tot gassen die aanleiding geven tot voorspelbare reactieproducten en / of voor on-massabepalingen. Met andere woorden, voor de meest veeleisende toepassingen is het potentieel van ICP-CRC-QMS-instrumenten beperkt door het gebrek aan controle van de celchemie bij het gebruik van zeer reactieve gassen.

In 2012 heeft de introductie van een nieuw type quadrupool-gebaseerd ICP-MS-instrument (Triple quadrupole ICP-MS) de controle over de celchemie verbeterd en het concept van chemische resolutie als middel om spectrale overlap te voorkomen mogelijk gemaakt. Triple quadrupole ICP-MS is een krachtige en elegante benadering voor het bereiken van interferentievrije omstandigheden voor elementaire en isotopische analyse van elementen die lijden aan sterke spectrale overlap.

De eerste triple quadrupole ICP-MS werd commercieel geïntroduceerd door Agilent (8800 ICP-MS QQQ) in 2012. Sinds 2017 werd ook door Thermo Fisher Scientific een iCAP TQ ICP-MS geïntroduceerd.

### 3.2. PRINCIPE TRIPLE QUADRUPOLE-TECHNOLOGIE

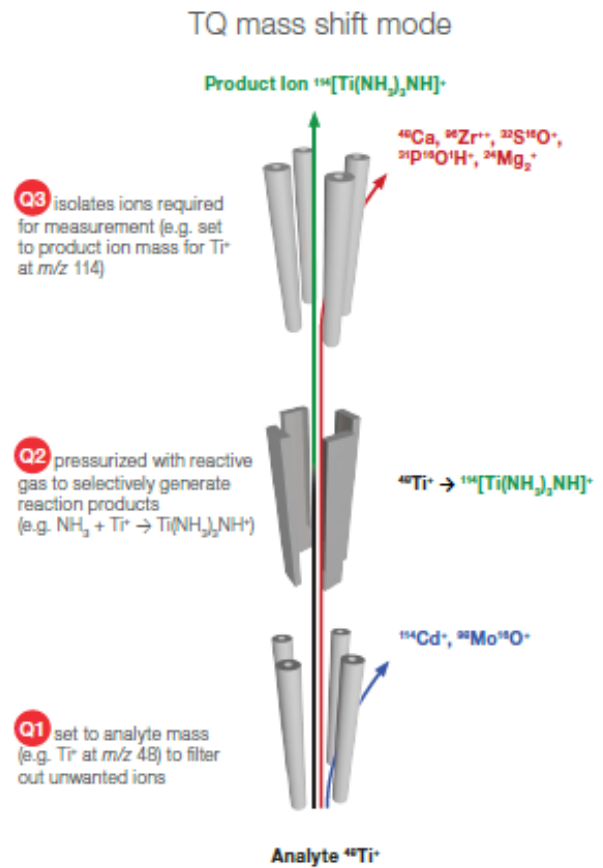
Hoe werkt de triple quadrupole-technologie?<sup>2</sup>

---

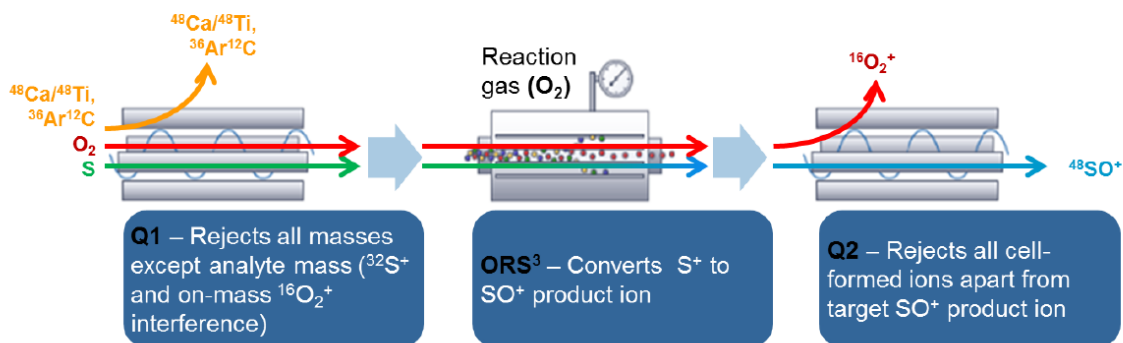
<sup>2</sup> Thermo Scientific iCAP TQ ICP-MS, Redefining triple quadrupole technology with unique ease of use, PRODUCTION SPECIFICATIONS, ThermoScientific

De interferentieverwijdering met triple quadrupole technologie wordt mogelijk gemaakt door de combinatie van twee massafilters, Q1 en Q3 die ionen isoleren en een Q2 CRC, gesitueerd tussen Q1 en Q3 dat specifieke reactieproducten genereert. Deze technologie kan worden gebruikt in verschillende manieren om de meest effectieve verwijdering van interferentie te bereiken:

- ✓ SQ-modus: gebruikmakend van slechts één quadrupool massafilter (Q3) voor multi-elementaire analyse in standaardmodus (geen cel gas) of botsingscel met helium en kinetische energie discriminatie (SQ-KED). Q1 fungeert hierbij louter als een ion guide.
- ✓ TQ “on massa”-modus: Triple quadrupool “on massa” modus voor detectie van het analyt zonder verandering van de analyt massa. Het reactiegas wordt gebruikt om de interferentie selectief te verwijderen op de analytmassa.
- ✓ TQ “mass shift”-modus: Triple quadrupool-massaverschuiving modus voor detectie van de analyt als een product-ion bij een verschillende massa vergeleken met het oorspronkelijke ion. Het reactiegas wordt gebruikt om de analyt selectief naar een massa te verplaatsen dat niet overlapt met de interferentie.



Figuur 5: Principe triple quadrupole technologie, vb. Ti reactie  $NH_3$  (Thermo Fisher Scientific)



Figuur 6 : Voorbeeld van reactie set-up voor de bepaling van zwavel gebruik makend van  $O_2$  reactie (Agilent).

Voor bijkomende info :

- Thermo Fisher Scientific : <https://www.thermofisher.com/order/catalog/product/731553>
- Agilent: <https://www.agilent.com/en/products/icp-ms/icp-ms-systems/8900-triple-quadrupole-icp-ms>

### 3.3. MULTI ELEMENT METHODE ONTWIKKELING

Voor de methode ontwikkeling werd beroep gedaan op de applicatiespecialisten van Agilent (Alain Desprez, Yolande Abdelnour) en Thermo Fisher Scientific (Simon Lofthouse, Claudia Charko, Peter Hoskam, Leslie De Keyser). Er werd gevraagd om een multi-element bepalingmethode (zie periodiek systeem der elementen hieronder) op te stellen met rhodium als (enige) interne standaard.

H																	He	
Li	Be											B	C	N	O	F	Ne	
Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar	
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr	
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe	
Cs	Ba	La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn	
Fr	Ra	Ac																
			Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu		
			Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr		

#### 3.3.1. 8900 ICP-MS QQQ (AGILENT)

In het geval van 8900 ICP-MS QQQ (Agilent) werden volgende gas modes opgenomen in de methode:

- ✓ No Gas SQ
- ✓ H<sub>2</sub> MS/MS
- ✓ He SQ
- ✓ O<sub>2</sub> + H<sub>2</sub> MS/MS

De kalibratie concentratieniveaus waren als volgt:

- ✓ 0 – 0.1 – 0.5 – 2.5 – 5 – 25 – 50 – 100 µg/l voor alle elementen
- ✓ Bijkomend 250 µg/l voor Ag, Al, Ca, Co, Cr, Cs, Cu, Fe, K, Li, Mg, Mn, Na, Ni, P, Rb, S, Si, Sr en Zn
- ✓ Voor de matrix elementen bijkomend 1 – 5 – 10 – 25 mg/l (Na, Mg, Ca, K, S, Si, P)

De gedigesteerde monsters werden in een 1/5 verdunning geanalyseerd (voor het oorspronkelijk monster is dit een 1/10 verdunning). Deze verdunning werd automatisch uitgevoerd door een prepFAST syringe driven inline dilution system. Bijkomend werden ook een aantal analyses uitgevoerd gebruik makend van argon dilutie met High Matrix Introduction (HMI). De interne standaard (Rh 25 µg/l) werd on-line toegevoegd (verhouding 1/5).

#### 3.3.2. ICAP TQ ICP-MS (THERMO FISHER SCIENTIFIC)

In het geval van iCAP TQ ICP-MS (Thermo Fisher Scientific) werden volgende gas modes opgenomen in de methode :

- ✓ SQ N/A Single quad no gas
- ✓ SQ KED Single quad He KED (4.7ml/min He)
- ✓ TQ O2 Triple quad O<sub>2</sub> mode (0.42ml/min O<sub>2</sub>) - high resolution (1 amu on Q1)

De kalibratie concentratieniveaus waren als volgt:

- ✓ 0 – 10 – 50 – 100 µg/l voor alle elementen (excl. matrix elementen)
- ✓ Na – 5, 25, 50 mg/l; Mg – 1, 5, 10 mg/l; Si – 0.5, 2.5, 5 mg/l; P – 0.2, 1, 2 mg/l; S – 2.5, 12.5, 25 mg/l; K – 0.1, 5, 10 mg/l; Ca – 2, 10, 20 mg/l.

De gedigesteerde monsters werden in een 1/5 verdunning geanalyseerd (voor het oorspronkelijk monster is dit een 1/10 verdunning). De verdunning werd automatisch uitgevoerd door een prepFAST syringe driven inline dilution system. Er werd gebruik gemaakt van de high matrix insert. De interne standaard (Rh 20 µg/l in 5 % butanol) werd on-line toegevoegd (verhouding 1/5).

### 3.3.3. WEERHOUDEN INSTELLINGEN

Bij de optimalisatie werden verschillende modes en massa's - waar mogelijk - geanalyseerd, in Tabel 4 zijn de weerhouden isotopen + mode weergegeven voor de rapportering van beide instrumenten.

Tabel 4 : Weerhouden isotopen en meetmode

8900 ICP-MS QQQ	iCAP TQ ICP-MS	8900 ICP-MS QQQ	iCAP TQ ICP-MS
7 Li [ No Gas ]	7Li (M-SQ-N/A)	111 -> 111 Cd [ O2+H2 ]	111Cd   111Cd (M-TQ-O2)
9 Be [ No Gas ]	9Be (M-SQ-N/A)	115 -> 115 In [ O2+H2 ]	115In (M-SQ-KED)
10 B [ No Gas ]	11B (M-SQ-N/A)	118 -> 118 Sn [ O2+H2 ]	118Sn (M-SQ-KED)
23 Na [ He ]	23Na (M-SQ-KED)	121 -> 121 Sb [ O2+H2 ]	121Sb (M-SQ-KED)
24 Mg [ He ]	24Mg (M-SQ-KED)	125 -> 125 Te [ O2+H2 ]	125Te (M-SQ-KED)
27 Al [ No Gas ]	27Al (M-SQ-KED)	133 Cs [ He ]	133Cs (M-SQ-KED)
28 -> 28 Si [ H2 ]	28Si   28Si.18O (M-TQ-O2)	135 Ba [ He ]	138Ba (M-SQ-KED)
31 -> 47 P [ O2+H2 ]	31P   31P.16O (M-TQ-O2)	139 La [ He ]	139La (M-SQ-KED)
32 -> 48 S [ O2+H2 ]	32S   32S.16O (M-TQ-O2)	140 Ce [ He ]	140Ce (M-SQ-KED)
39 -> 39 K [ O2+H2 ]	39K (M-SQ-KED)	141 Pr [ He ]	141Pr (M-SQ-KED)
40 -> 40 Ca [ O2+H2 ]	44Ca (M-SQ-KED)	146 Nd [ He ]	146Nd (M-SQ-KED)
45 -> 61 Sc [ O2+H2 ]	45Sc (M-SQ-KED)	147 Sm [ He ]	149Sm (M-SQ-KED)
47 -> 63 Ti [ O2+H2 ]	49Ti (M-SQ-KED)	151 Eu [ He ]	153Eu (M-SQ-KED)
51 -> 67 V [ O2+H2 ]	51V (M-SQ-KED)	155 Gd [ He ]	157Gd (M-SQ-KED)
52 Cr [ He ]	52Cr (M-SQ-KED)	159 Tb [ He ]	159Tb (M-SQ-KED)
55 -> 55 Mn [ O2+H2 ]	55Mn (M-SQ-KED)	161 Dy [ He ]	163Dy (M-SQ-KED)
56 -> 56 Fe [ H2 ]	56Fe (M-SQ-KED)	165 Ho [ He ]	165Ho (M-SQ-KED)
59 Co [ He ]	59Co (M-SQ-KED)	166 Er [ He ]	166Er (M-SQ-KED)
60 -> 60 Ni [ O2+H2 ]	60Ni (M-SQ-KED)	169 Tm [ He ]	169Tm (M-SQ-KED)
65 Cu [ He ]	63Cu (M-SQ-KED)	172 Yb [ He ]	172Yb (M-SQ-KED)
66 -> 66 Zn [ O2+H2 ]	66Zn (M-SQ-KED)	175 Lu [ He ]	175Lu (M-SQ-KED)
71 -> 71 Ga [ O2+H2 ]	71Ga (M-SQ-KED)	178 Hf [ He ]	178Hf (M-SQ-KED)
72 Ge [ He ]	74Ge (M-SQ-KED)	181 Ta [ He ]	181Ta (M-SQ-KED)
75 -> 91 As [ O2+H2 ]	75As (M-SQ-KED)	182 W [ He ]	182W (M-SQ-KED)
78 -> 94 Se [ O2+H2 ]	80Se   80Se.16O (M-TQ-O2)	185 Re [ He ]	185Re (M-SQ-KED)
85 Rb [ He ]	85Rb (M-SQ-KED)	191 Ir [ No Gas ]	193Ir (M-SQ-KED)

8900 ICP-MS QQQ	iCAP TQ ICP-MS	8900 ICP-MS QQQ	iCAP TQ ICP-MS
88 Sr [ He ]	88Sr (M-SQ-KED)	195 Pt [ He ]	195Pt (M-SQ-KED)
89 -> 105 Y [ O2+H2 ]	89Y (M-SQ-KED)	197 Au [ No Gas ]	197Au (M-SQ-KED)
90 Zr [ He ]	90Zr (M-SQ-KED)	201 -> 201 Hg [ O2+H2 ]	202Hg   202Hg (M-TQ-O2)
93 -> 125 Nb [ O2+H2 ]	93Nb (M-SQ-KED)	203 Tl [ He ]	205Tl (M-SQ-KED)
95 Mo [ He ]	98Mo (M-SQ-KED)	208 Pb [ He ]	208Pb (M-SQ-KED)
99 Ru [ He ]	101Ru (M-SQ-KED)	209 Bi [ He ]	209Bi (M-SQ-KED)
105 Pd [ He ]	105Pd (M-SQ-KED)	232 Th [ No Gas ]	232Th (M-SQ-KED)
107 Ag [ He ]	107Ag (M-SQ-KED)	238 U [ He ]	238U (M-SQ-KED)



## HOOFDSTUK 4. BESPREKING RESULTATEN

Een 25-tal oppervlaktewaters, 25-tal afvalwaters en een aantal controlemonsters werden aangeboden aan de applicatielaboratoria van Agilent en Thermo Fisher Scientific. Er werd een demonstratie georganiseerd door Agilent in het Laboratorium VMM (Gent, 27-28/09/2018) en door Thermo Fisher Scientific in het applicatielaboratorium te Breda (4-5/12/2018).

### 4.1. QUALITY CONTROL EN REFERENTIEMATERIALEN

Ter verificatie van de methode werden een aantal WAC controle monsters en referentiematerialen geanalyseerd. In Tabel 5 zijn de terugvindingen en de relatieve standaard deviaties (RSD) weergegeven voor het LCS OW (laboratory control sample – oppervlaktewater) en LCS AW (laboratory control samples – afvalwater) controle monster. Deze controle monsters werden om de ca. 10 monsters geanalyseerd in de meetreeks (n = 6). In het geval van ICP-QQQ-MS werd zowel in een 1/10 verdunning geanalyseerd a.d.h.v. FAST syringe driven inline dilution system (dilution 1/10) alsook gebruik makend van High Matrix Introduction (HMI-4). Conform WAC/III/B/011 bedraagt het criterium voor de terugvinding 80 -120 %. Hierbij dient opgemerkt dat de LCS oplossing geanalyseerd met de ICP-QQQ-MS afkomstig was van een andere leverancier dan de LCS oplossing geanalyseerd met de iCAP TQ ICP-MS. Bijkomend onderzoek heeft aangetoond dat voor As en Sn de door de leverancier opgegeven referentiewaarden van de LCS oplossing die geanalyseerd werd met de ICP-QQQ-MS niet juist zijn. De juistheid van de ICP-QQQ-MS analyse werd bv. wel bevestigd in de meting van het LOQ controle monster (zie Tabel 8).

*Tabel 5: Terugvindingen en relatieve standaard deviatie (n=6) van het LCS OW en LCS AW controle monster bepaald met 8900 ICP-MS QQQ en iCAP TQ ICP-MS.*

	ICP-QQQ-MS					iCAP TQ ICP-MS		
	LCS OW	Dilution 1/10		HMI-4		LCS AW	Dilution 1/10	
	exp. value	recovery	RSD	recovery	RSD	exp.value	recovery	RSD
	µg/l	%	%	%	R	µg/l	%	%
Ag	1,2	97%	2%	98%	2%	3	103%	2%
Al						300	105%	2%
As	7,5	42%	4%	43%	1%	15	99%	1%
B	300	95%	4%	99%	3%	300	99%	5%
Ba	30	93%	1%	104%	2%	30	104%	2%
Be	1,5	97%	8%	93%	3%	3	98%	7%
Ca	100	99%	2%	97%	3%	200	93%	2%
Cd	1,2	97%	3%	99%	2%	2,4	99%	2%
Ce						30	104%	1%
Co	0,9	88%	3%	101%	2%	1,8	103%	6%
Cr	30	89%	2%	102%	3%	30	105%	3%
Cu	30	92%	2%	104%	1%	30	103%	2%
Fe						300	104%	1%
K	5	106%	3%	99%	6%	10	97%	2%
Mg	10	98%	9%	107%	7%	20	95%	3%
Mn						30	101%	4%

	ICP-QQQ-MS					iCAP TQ ICP-MS		
	LCS OW	Dilution 1/10		HMI-4		LCS AW	Dilution 1/10	
	exp. value	recovery	RSD	recovery	RSD	exp.value	recovery	RSD
	µg/l	%	%	%	R	µg/l	%	%
Mo	30	97%	2%	102%	1%	30	97%	2%
Na	25	98%	11%	102%	5%	50	95%	3%
Ni	30	91%	3%	95%	1%	30	102%	3%
Pb	30	98%	2%	106%	3%	30	104%	2%
S	25	99%	6%	99%	2%	50	89%	5%
Sb	30	91%	2%	94%	2%	30	99%	5%
Se	9	86%	4%	86%	2%	15	100%	3%
Sn	30	71%	2%	73%	1%	30	104%	2%
Te	30	81%	1%	82%	1%	30	101%	5%
Ti	30	89%	2%	92%	1%	30	114%	4%
Tl	1,5	96%	1%	106%	2%	3	103%	2%
U	0,9	103%	3%	103%	4%	1,5	104%	2%
V	7,5	96%	2%	94%	1%	15	105%	3%
Zn	150	89%	2%	99%	1%	150	100%	2%

Bijkomend werden ook SRM 1640a (Trace Elements in Natural Water) en SPS-SW2 Batch 135 (elements in surface water) rechtstreeks geanalyseerd met iCAP TQ ICP-MS in 6-voud. De bekomen terugvindingen (recovery) en relative standard deviaties zijn weergegeven in Tabel 6.

Tabel 6: Terugvindingen en relatieve standaard deviatie (n=6) van SRM 1640a en SPS-SW2 bepaald met iCAP TQ ICP-MS.

		SRM 1640a			SPS-SW 2		
		reference value	recovery	RSD (n =6)	reference value	recovery	RSD (n =6)
Ag	µg/l	8,08	100%	1%			
Al	µg/l	53	94%	4%	250	96%	2%
As	µg/l	8,07	95%	1%	50	96%	1%
B	µg/l	303	90%	3%	250	90%	4%
Ba	µg/l	151,8	100%	2%	250	99%	2%
Be	µg/l	3,03	90%	4%			
Ca	mg/l	5,6	108%	2%	10	111%	2%
Cd	µg/l	3,99	97%	2%	2,5	98%	1%
Ce	µg/l				2,5	103%	2%
Co	µg/l	20,24	97%	2%	10	98%	2%
Cr	µg/l	40,54	95%	1%	10	95%	2%
Cs	µg/l				10	103%	3%
Cu	µg/l	85,75	98%	2%	100	97%	1%
Dy	µg/l				2,5	103%	3%
Er	µg/l				2,5	103%	2%
Eu	µg/l				2,5	105%	2%
Fe	µg/l	36,8	97%	1%	100	97%	2%
Gd	µg/l				2,5	101%	2%
Ho	µg/l				2,5	103%	2%
K	mg/l	0,58	92%	1%	1	92%	2%
La	µg/l				2,5	104%	2%

		SRM 1640a			SPS-SW 2		
		reference value	recovery	RSD (n =6)	reference value	recovery	RSD (n =6)
Li	µg/l	0,4	52%	108%			
Lu	µg/l				2,5	104%	2%
Mg	mg/l	1,06	89%	2%	2	87%	2%
Mn	µg/l	40,39	97%	2%	50	99%	1%
Mo	µg/l	45,6	92%	0%	50	91%	1%
Na	mg/l	3,14	85%	2%	10	87%	2%
Nd	µg/l				2,5	102%	3%
Ni	µg/l	25,32	96%	3%	50	97%	2%
P	mg/l				0,5	87%	5%
Pb	µg/l	12,1	104%	2%	25	102%	2%
Pr	µg/l				2,5	106%	2%
Rb	µg/l	1,198	102%	12%	50	101%	2%
S	mg/l				10	78%	4%
Sb	µg/l	5,1	77%	9%			
Sc	µg/l				2,5	85%	6%
Se	µg/l	20,13	98%	2%	10	99%	3%
Si	mg/l	5,21	86%	3%	5	86%	3%
Sm	µg/l				2,5	102%	3%
Sr	µg/l	126	101%	2%	250	102%	2%
Tb	µg/l				2,5	103%	1%
Th	µg/l				2,5	102%	2%
Tl	µg/l	1,619	103%	1%	2,5	102%	2%
Tm	µg/l				2,5	102%	2%
U	µg/l	25,35	101%	3%	2,5	101%	1%
V	µg/l	15,05	94%	2%	50	97%	2%
Y	µg/l				2,5	100%	3%
Yb	µg/l				2,5	103%	2%
Zn	µg/l	55,64	100%	2%	100	101%	2%

In Tabel 7 zijn de terugvindingen (recovery) en de Limit of Quantification (LOQ, berekend als 6 \* standaard deviatie) weergegeven voor het LOQ OW controle monster. Dit controle monsters werd om de ca. 10 monsters geanalyseerd in de meetreeks (n = 6). In de tabel zijn eveneens de milieukwaliteitsnorm (MKN, Vlarem II, Bijlage 2.3.1, art 3), 30 % van deze MKN en LOQ<sub>max</sub> oppervlaktewater (WAC/VI/A/001 Prestatiekenmerken, versie 11/2018) weergegeven. De berekende LOQ waarden zijn in het groen weergegeven wanneer  $LOQ \leq 30 \% MKN$ , in het oranje wanneer  $LOQ \leq 30 \% LOQ_{max}$  oppervlaktewater en in het rood wanneer  $LOQ > 30 \% LOQ_{max}$  oppervlaktewater. Hierbij dient opgemerkt dat de LOQ en LCS oplossing geanalyseerd met de ICP-QQQ-MS afkomstig waren van een andere leverancier dan de LOQ en LCS oplossing geanalyseerd met de iCAP TQ ICP-MS. Bijkomend onderzoek heeft aangetoond dat voor As en Sn de door de leverancier opgegeven referentiewaarden van de LOQ en LCS oplossing die geanalyseerd werd met de ICP-QQQ-MS niet juist zijn (zie Tabel 7). In Tabel 8 zijn de LOQ waarden en terugvindingen samengevat waarbij voor beide instrumenten op eenzelfde LOQ oplossing de analyses werden uitgevoerd. Voor de iCAP TQ ICP-MS zijn om deze reden de data in Tabel 7 en Tabel 8 gelijk. De gemeten waarden voor As en Sn komen in deze oplossing wel overeen met de referentiewaarde (zie Tabel 8). De LOQ waarden in Tabel 8 dienen als indicatief te worden geïnterpreteerd, gezien in het geval van ICP-QQQ-MS slechts 3 metingen werden uitgevoerd (n=3).

Tabel 7: Berekening van de LOQ oppervlaktewater op basis van de bepaling van het LOQ OW controle monster bepaald met 8900 ICP-MS QQQ en iCAP TQ ICP-MS (de geanalyseerde LOQ oplossingen zijn afkomstig van verschillende leveranciers, de door de leverancier opgegeven gehalten voor As en Sn in geval van ICP-MS QQQ zijn niet correct). De recovery werd berekend op basis van de LOQ OW concentratie.

				LOQOW	ICPQQQMS			iCAPTQ	ICPQQQMS			iCAPTQ
	MKN	30%MKN	LOQ <sub>max</sub>	µg/l	LOQ (µg/l)			Recovery (%)				
				µg/l	v1/10	HMI4	v1/10	v1/10	HMI4	v1/10		
Ag	0.4	0.12	0.4	0,4	0,06	0,08	0,19	104%	105%	110%		
As	5	1.5	2.5	2,5	0,41	0,18	0,38	45%	45%	105%		
B	700	210	210	100	40,07	54,66	10,33	100%	98%	111%		
Ba	70	21	21	10	1,91	2,90	0,93	92%	105%	117%		
Be	0.1	0.03	0.5	0,5	0,19	0,21	0,29	97%	91%	99%		
Cd	0.8	0.24	0.4	0,4	0,05	0,07	0,11	100%	100%	108%		
Co	0.6	0.18	0.3	0,3	0,07	0,12	0,32	88%	102%	113%		
Cr	50	15	15	10	1,97	5,75	2,12	87%	101%	110%		
Cu	50	15	15	10	1,38	5,69	2,17	93%	109%	110%		
Mo	350	105	105	10	1,51	2,14	0,93	97%	102%	108%		
Ni	30	9	9	10	1,55	3,16	1,91	90%	94%	112%		
Pb	50	15	15	10	0,96	1,60	0,50	95%	106%	113%		
Sb	100	30	30	3	1,58	1,10	7,92	312%	314%	342%		
Se	3	0.9	3	3	1,69	0,92	0,78	95%	87%	113%		
Sn	40	12	12	10	0,71	0,55	1,68	74%	73%	110%		
Te	100	30	30	10	1,94	1,90	8,79	81%	82%	105%		
Ti	100	30	30	10	0,91	2,67	10,75	89%	91%	140%		
Tl	0.2	0.06	0.5	0,5	0,06	0,11	0,10	93%	106%	114%		
U	1	0.3	0.3	0,3	0,05	0,17	0,09	104%	108%	112%		
V	5	1.5	2.5	2,5	0,41	0,40	1,69	100%	94%	107%		
Zn	200	60	60	50	6,15	21,45	6,18	88%	96%	108%		
				mg/l								
Ca				100				99%	97%	96%		
K				5				106%	100%	100%		
Mg				10				99%	102%	99%		
Na				25				100%	97%	95%		
S				25				101%	97%	86%		

Tabel 8: Berekening van de LOQ oppervlaktewater op basis van de bepaling van hetzelfde LOQ OW controle monster bepaald met 8900 ICP-MS QQQ (n = 3) en iCAP TQ ICP-MS (n = 6). De recovery werd berekend op basis van de LOQ OW concentratie.

				LOQOW	ICPQQQMS			iCAPTQ	ICPQQQMS			iCAPTQ
	MKN	30%MKN	LOQ <sub>max</sub>	µg/l	LOQ (µg/l)			Recovery (%)				
				µg/l	v1/10	HMI4	v1/10	v1/10	HMI4	v1/10		
Ag	0.4	0.12	0.4	0,4	0,09	0,09	0,19	99%	102%	110%		
As	5	1.5	2.5	2,5	0,80	0,14	0,38	100%	106%	105%		
B	700	210	210	100	42,84	12,90	10,33	107%	119%	111%		
Ba	70	21	21	10	1,32	3,33	0,93	96%	112%	117%		
Be	0.1	0.03	0.5	0,5	0,35	0,25	0,29	100%	97%	99%		

					ICPQQMS		iCAPTQ	ICPQQMS		iCAPTQ
				LOQOW	LOQ (µg/l)			Recovery (%)		
	MKN	30%MKN	LOQ <sub>max</sub>	µg/l	v1/10	HMI4	v1/10	v1/10	HMI4	v1/10
Cd	0.8	0.24	0.4	0,4	0,17	0,08	0,11	103%	105%	108%
Co	0.6	0.18	0.3	0,3	0,11	0,02	0,32	96%	112%	113%
Cr	50	15	15	10	3,53	0,98	2,12	103%	122%	110%
Cu	50	15	15	10	3,33	1,56	2,17	109%	117%	110%
Mo	350	105	105	10	1,97	0,21	0,93	97%	105%	108%
Ni	30	9	9	10	2,04	0,88	1,91	99%	106%	112%
Pb	50	15	15	10	1,50	1,73	0,50	107%	118%	113%
Sb	100	30	30	3	1,71	1,05	7,92	335%	355%	342%
Se	3	0.9	3	3	1,55	2,96	0,78	97%	100%	113%
Sn	40	12	12	10	1,11	1,18	1,68	97%	103%	110%
Te	100	30	30	10	0,51	1,22	8,79	101%	108%	105%
Ti	100	30	30	10	1,79	0,34	10,75	99%	103%	140%
Tl	0.2	0.06	0.5	0,5	0,15	0,05	0,10	95%	111%	114%
U	1	0.3	0.3	0,3	0,10	0,07	0,09	103%	107%	112%
V	5	1.5	2.5	2,5	0,51	0,14	1,69	105%	101%	107%
Zn	200	60	60	50	7,91	3,09	6,18	100%	112%	108%
				mg/l						
Ca				100				104%	104%	96%
K				5				111%	104%	100%
Mg				10				105%	117%	99%
Na				25				105%	108%	95%
S				25				108%	109%	86%

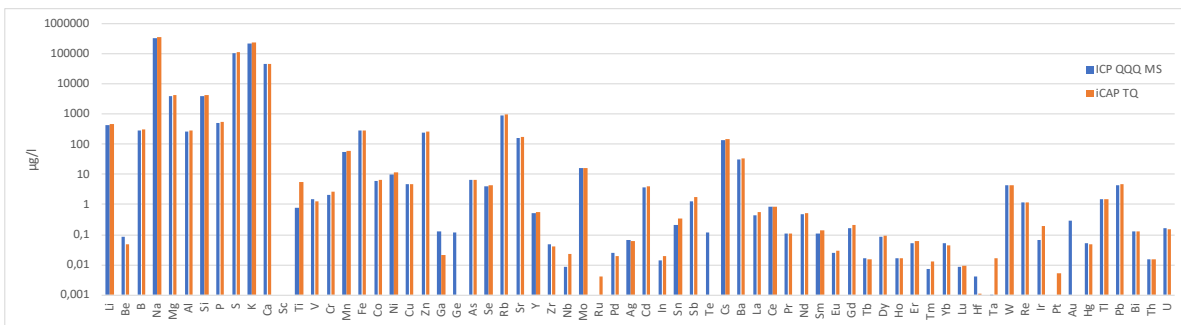
Voor alle elementen kan gesteld worden dat beide instrumenten in multi-element mode voldoen aan de wettelijk vereiste LOQ<sub>max</sub> oppervlaktewater. De beperkte overschrijding voor Co is deels te wijten aan het onvoldoende corrigeren van Rh als interne standaard. Door gebruik te maken van bv. Sc of Ge zou dit verholpen kunnen worden. Daarnaast kan de gevoeligheid per element verbeterd worden door langere meettijden (dwell time, sweeps) te gebruiken. In het geval van iCAP TQ MS werd per element in totaal gedurende 0,3 seconde (0,02 s dwell time \* 5 sweeps \* 3 runs) tot 1,5 seconde (0,1 s dwell time \* 5 sweeps \* 3 runs) de intensiteit gemeten. De totale meettijd voor 68 elementen, inclusief stabilisatietijd voor het gebruik van de verschillende gassen, kan tot 3 minuten beperkt worden voor beide instrumenten.

Bijkomend kan voor alle elementen gesteld worden dat beide instrumenten in multi-element mode voldoen aan de 30 % van de MKN eis, met uitzondering van Ag, Be, Se en Tl. Voor de elementen Be en Tl kan dit grotendeels verklaard worden door het concentratieniveau van het LOQ monster dat ca. meer dan factor 10 hoger ligt dan 30 % van de MKN. Door de LOQ af te leiden op basis van een concentratieniveau rond deze 30 % van de MKN zou een lager (en realistischer) beeld worden verkregen van de gevoeligheid. Voor de elementen Ag en Se wordt verwacht dat met bijkomende optimalisatie van het instrument/methode eveneens een LOQ waarde zou kunnen verkregen worden die < 30 % van de MKN. Daarnaast, zoals hierboven reeds vermeld, kan de gevoeligheid per element verbeterd worden door langere meettijden (dwell time, sweeps) te gebruiken.

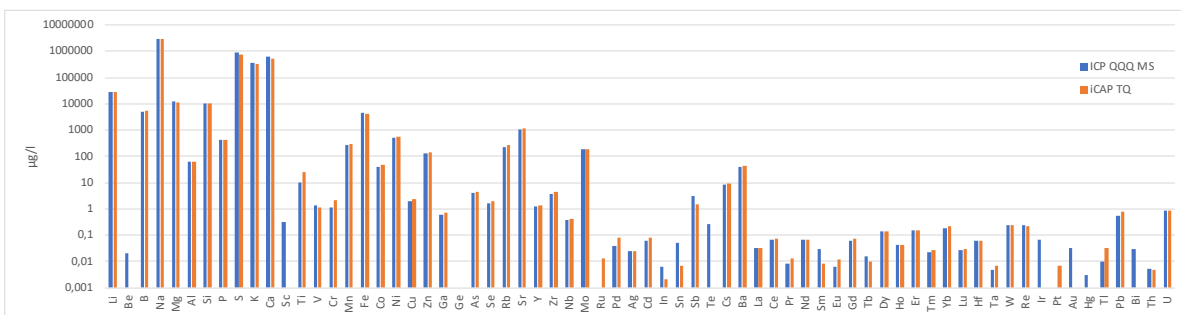
#### 4.2. MULTI-ELEMENT BEPALING OPPERVLAKTE- EN AFVALWATER

In Figuur 7 en Figuur 8, zijn bij wijze van voorbeeld de massa spectra weergegeven van de multi-element bepaling van een oppervlaktewater en een afvalwater uitgevoerd met beide instrumenten.

Opvallend zijn de goede gelijkenissen tussen de analysesresultaten voor de verschillende elementen enerzijds en het dynamisch concentratiebereik over > 8 grootte ordes (0,01 tot 1 000 000 µg/l) anderzijds.

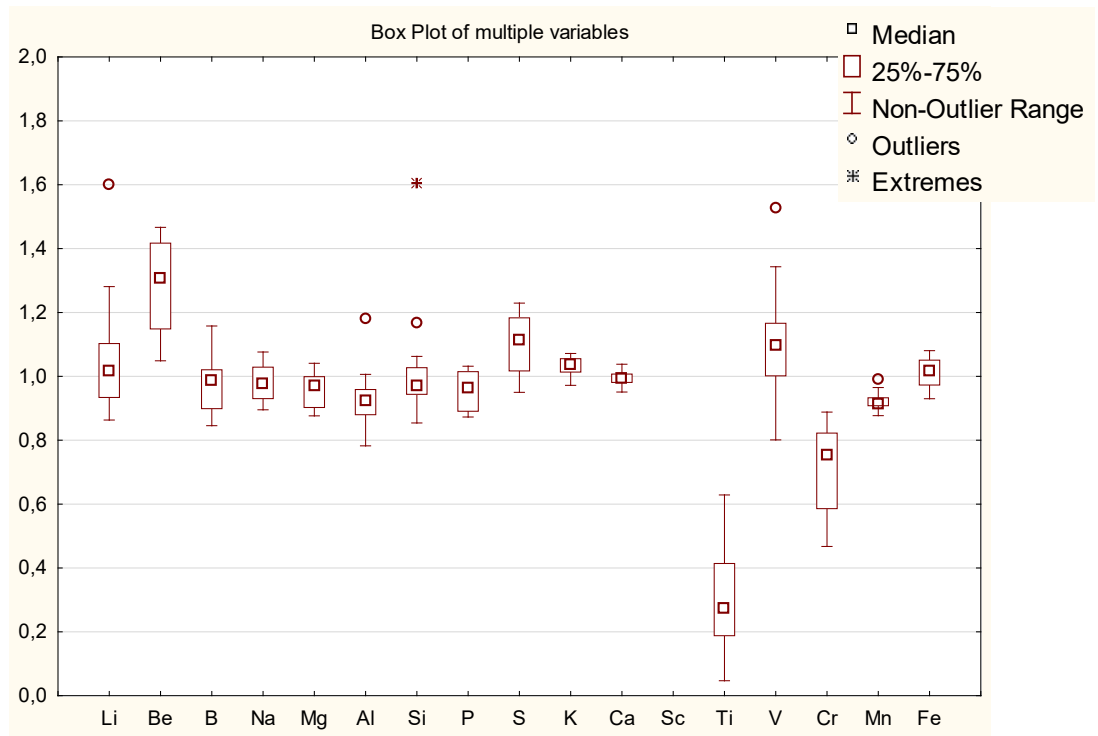


*Figuur 7 : Massa spectrum van oppervlaktewater 1 , van Lithium (6 amu) tot Uranium (238 amu), geanalyseerd met 8900 ICP-MS QQQ en iCAP TQ ICP-MS.*

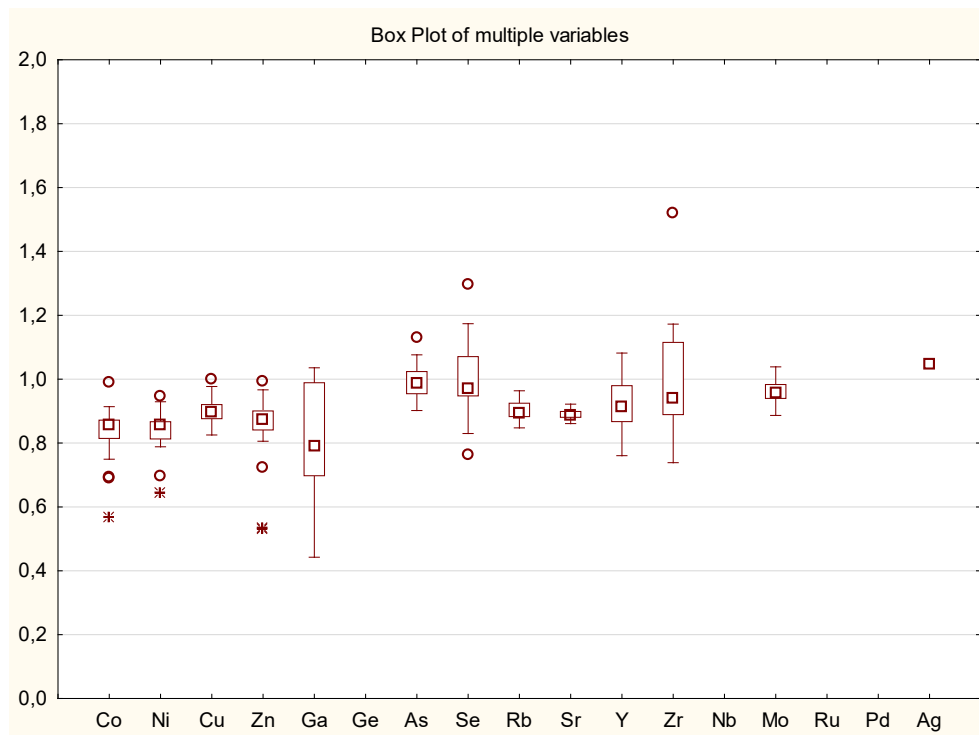


*Figuur 8 : Massa spectrum van afvalwater 2, van Lithium (6 amu) tot Uranium (238 amu), geanalyseerd met 8900 ICP-MS QQQ en iCAP TQ ICP-MS.*

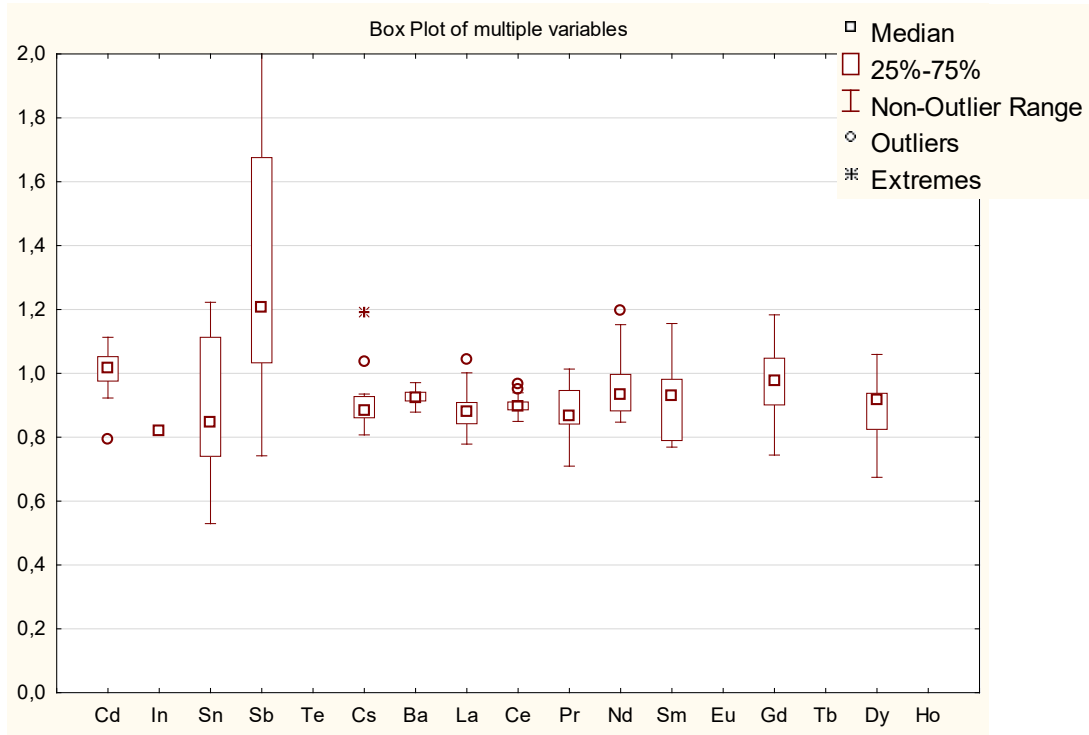
Voor de 25 oppervlaktewaters werd, voor elk element afzonderlijk, de verhouding berekend tussen het gehalte bepaald met 8900 ICP-MS QQQ versus iCAP TQ ICP-MS. Deze ratio's zijn uitgezet in box and whisker plots (Figuur 9 t.e.m. Figuur 12). De gedigesteerde monsters werden in een 1/5 verdunning geanalyseerd (1/10 verdunning t.o.v. oorspronkelijk monster). De verdunning werd automatisch uitgevoerd door een prepFAST syringe driven inline dilution system. Voor de berekening van de ratio werden enkel de gehaltenes > 0,1 µg/l (werkelijk gemeten > 10 ng/l) weerhouden.



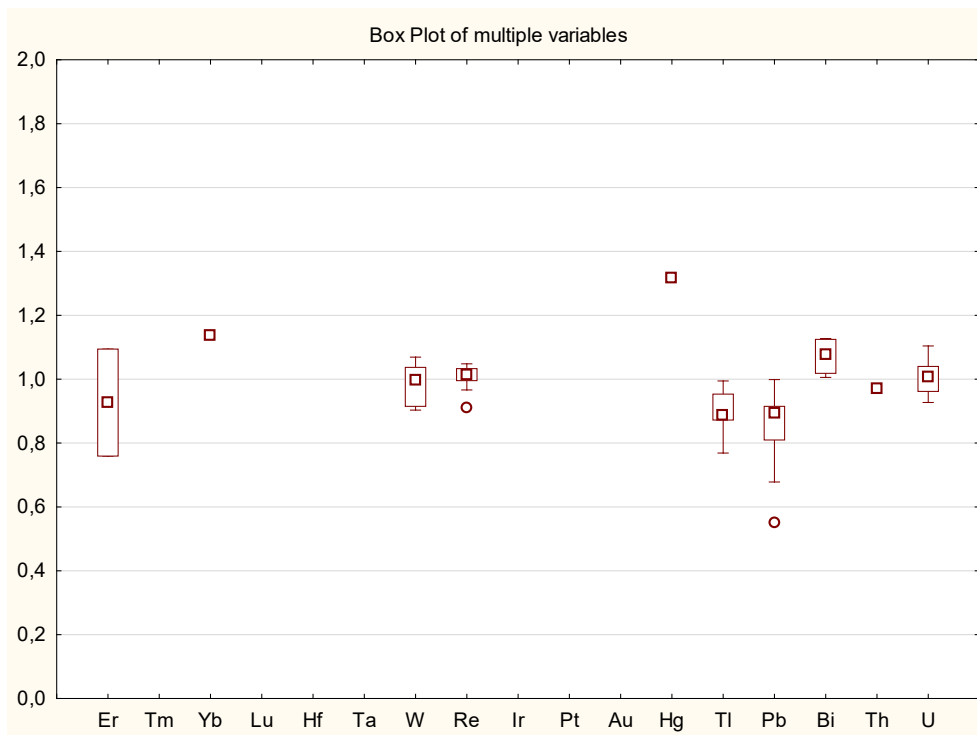
Figuur 9: Box and Whisker plot per element van ratio concentratie bepaald met 8900 ICP-MS QQ Q versus iCAP TQ ICP-MS in 25 oppervlaktewaters.



Figuur 10: Box and Whisker plot per element van ratio concentratie bepaald met 8900 ICP-MS QQQ versus iCAP TQ ICP-MS in 25 oppervlaktewaters.



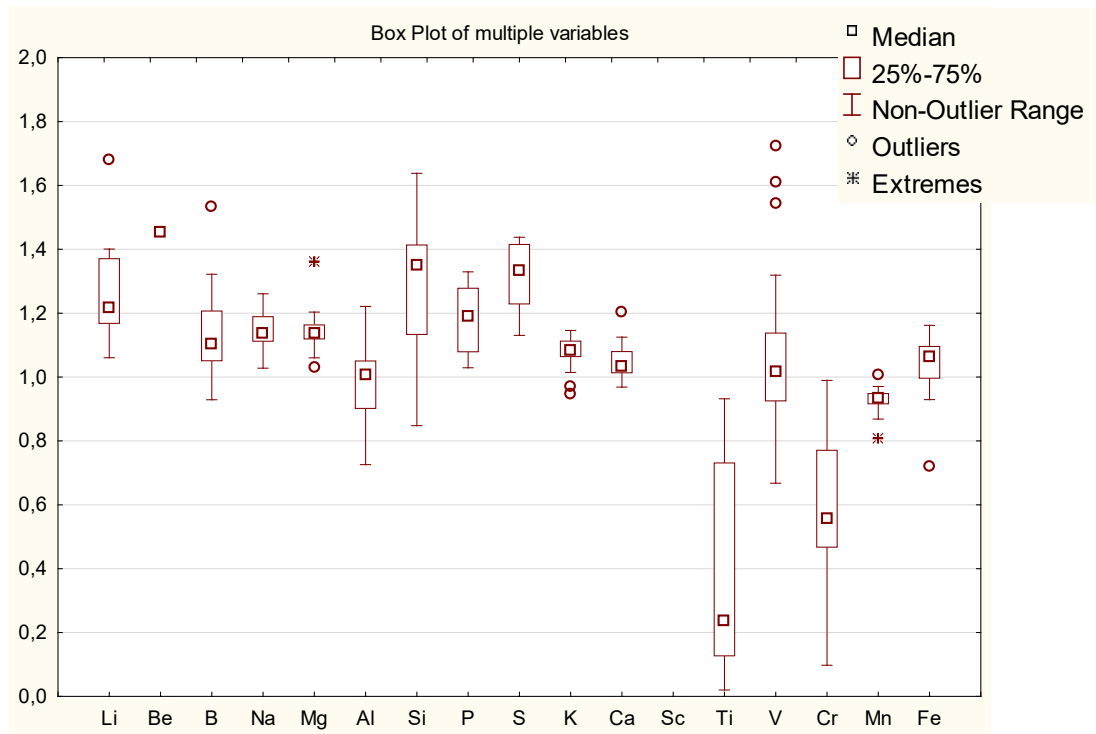
Figuur 11: Box and Whisker plot per element van ratio concentratie bepaald met 8900 ICP-MS QQQ versus iCAP TQ ICP-MS in 25 oppervlaktewaters.



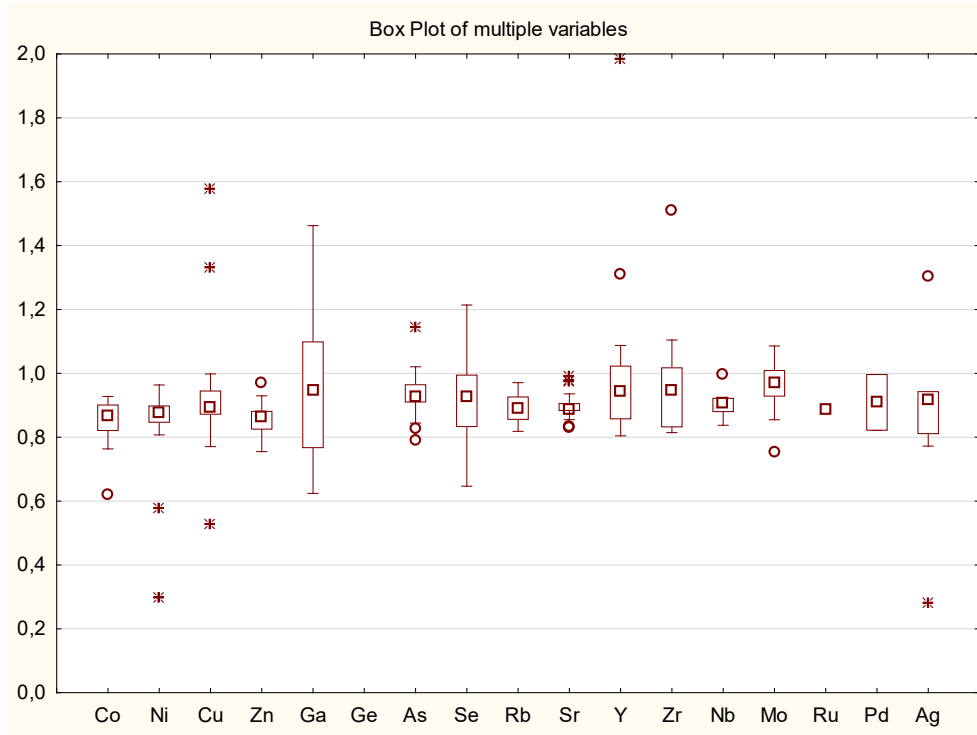
Figuur 12: Box and Whisker plot per element van ratio concentratie bepaald met 8900 ICP-MS QQQ versus iCAP TQ ICP-MS in 25 oppervlaktewaters.



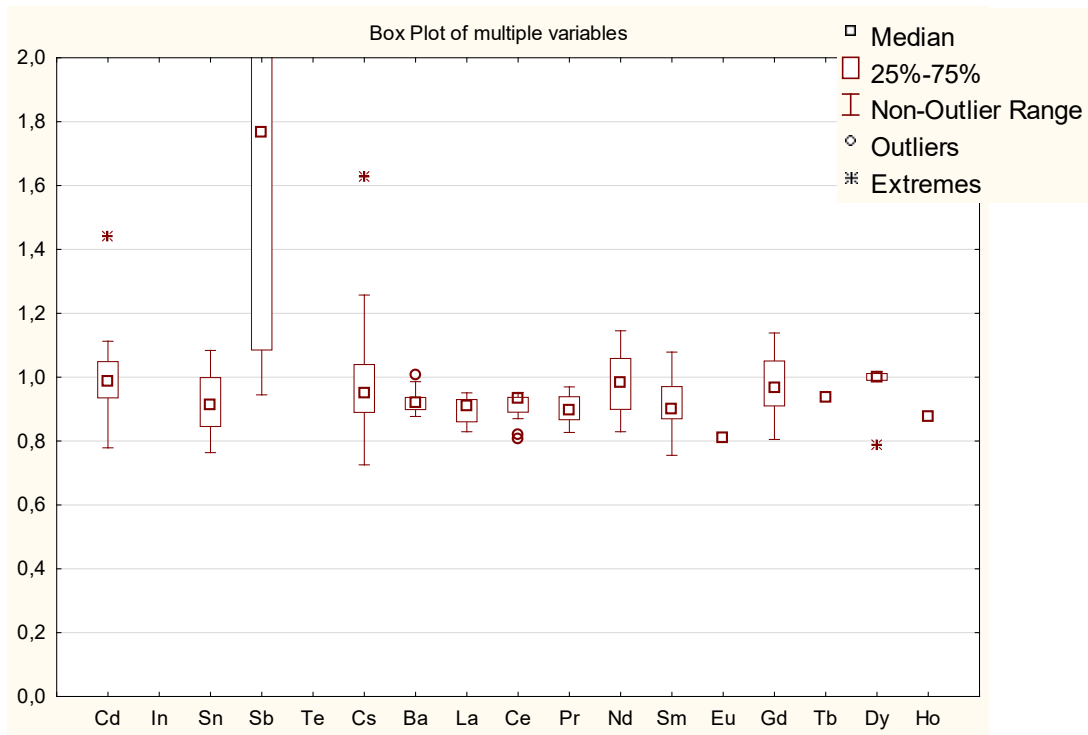
Voor de 25 afvalwaters werd eveneens, voor elk element afzonderlijk, de verhouding berekend tussen het gehalte bepaald met 8900 ICP-MS QQQ versus iCAP TQ ICP-MS. Deze ratio's zijn uitgezet in box and whisker plots (Figuur 13 t.e.m. Figuur 16). De gedigesterde monsters werden in een 1/5 verdunning geanalyseerd (1/10 verdunning t.o.v. oorspronkelijk monster). De verdunning werd automatisch uitgevoerd door een prepFAST syringe driven inline dilution system. Voor de berekening van de ratio werden enkel de gehaltenes > 0,1 µg/l (werkelijk gemeten > 10 ng/l) weerhouden.



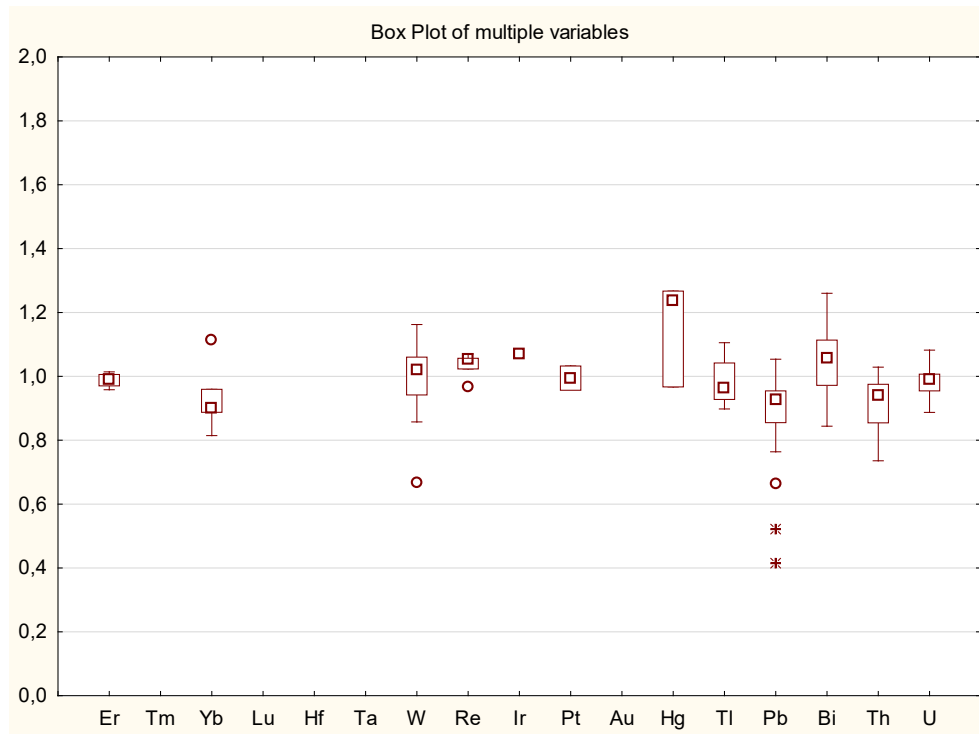
Figuur 13: Box and Whisker plot per element van ratio concentratie bepaald met 8900 ICP-MS QQQ versus iCAP TQ ICP-MS in 25 afvalwaters.



Figuur 14: Box and Whisker plot per element van ratio concentratie bepaald met 8900 ICP-MS QQQ versus iCAP TQ ICP-MS in 25 afvalwaters.



Figuur 15: Box and Whisker plot per element van ratio concentratie bepaald met 8900 ICP-MS QQQ versus iCAP TQ ICP-MS in 25 afvalwaters.



Figuur 16: Box and Whisker plot per element van ratio concentratie bepaald met 8900 ICP-MS QQQ versus iCAP TQ ICP-MS in 25 afvalwaters.

In het algemeen - en rekening houdend met de range aan concentratieniveaus - wordt een goede vergelijkbaarheid gevonden tussen beide bepalingen. Een belangrijke opmerking hierbij is dat een significant deel van de verschillen die werden vastgesteld te wijten zijn aan het onvoldoende ondervangen van de drift/matrix effecten. Als randvoorwaarde voor de multi-element methode werd slechts één interne standaard, rhodium, vooropgesteld en dit blijkt onvoldoende robuust en accuraat te zijn voor een multi-element bepaling met ICP-MS. Op basis van de analyse van de verschillende afval- en oppervlaktewaters is het wenselijk naast Rh ook  ${}^6\text{Li}$ , Sc, Ge en Ir te overwegen als interne standaard en dit in het bijzonder voor de bepaling van de lichtere elementen. In Tabel 4 zijn de voorkeursisotopen en modes weergegeven.

Volgende specifieke commentaren per element van Agilent.

- Matrix elementen worden soms in He mode geanalyseerd om gevoeligheid met factor 5 à 10 te verlagen
- Si : enigste element waarvoor enkel H<sub>2</sub> mode noodzakelijk is
- Sc : O<sub>2</sub> + H<sub>2</sub> in triple quadrupole mode (mass shift-modus) om interferentie Zr<sup>++</sup> te vermijden
- Voor Ti werden significante verschillen vastgesteld in de gehalten bepaald met beide instrumenten. Hierbij werd door Agilent opgemerkt dat het gebruik van O<sub>2</sub> + H<sub>2</sub> in triple quadrupole mode (mass shift-modus) de voorkeur geniet boven het gebruik van enkel O<sub>2</sub> (een andere optie is het gebruik van NH<sub>3</sub> voor de bepaling van Ti, dit werd echter niet geëvalueerd in het kader van deze studie).
- V : O<sub>2</sub> + H<sub>2</sub> mode
- Cr : He mode geeft beste resultaten
- Fe : H<sub>2</sub> mode geeft beste resultaten
- Cu : He mode geeft beste resultaten, O<sub>2</sub> + H<sub>2</sub> verwijdert onvoldoende ArNa<sup>+</sup>
- Zn : O<sub>2</sub> + H<sub>2</sub> verwijdert Ba<sup>++</sup>

- De O<sub>2</sub> + H<sub>2</sub> mode is ook Agilents voorkeurmethode voor het verwijderen van MO<sup>+</sup> interferenties (bv. MoO<sup>+</sup> op Cd, WO<sup>+</sup> op Hg)
- Pd : NH<sub>3</sub> mode on mass kan voordelen hebben voor verwijderen YO<sup>+</sup> (eenzelfde geldt voor Ru, Rh en Ag).
- REE : He mode (collisional focusing)

Volgende bijkomende specifieke commentaren per element van Thermo Fisher Scientific

- Lichtere elementen in standaard mode, interne standaard is noodzakelijk.
- O<sub>2</sub> mode is voorkeurmethode voor het verwijderen van MO<sup>+</sup> interferenties (bv. MoO<sup>+</sup> op Cd, WO<sup>+</sup> op Hg)
- Matrix elementen worden soms in He mode geanalyseerd om gevoeligheid met factor 5 à 10 te verlagen

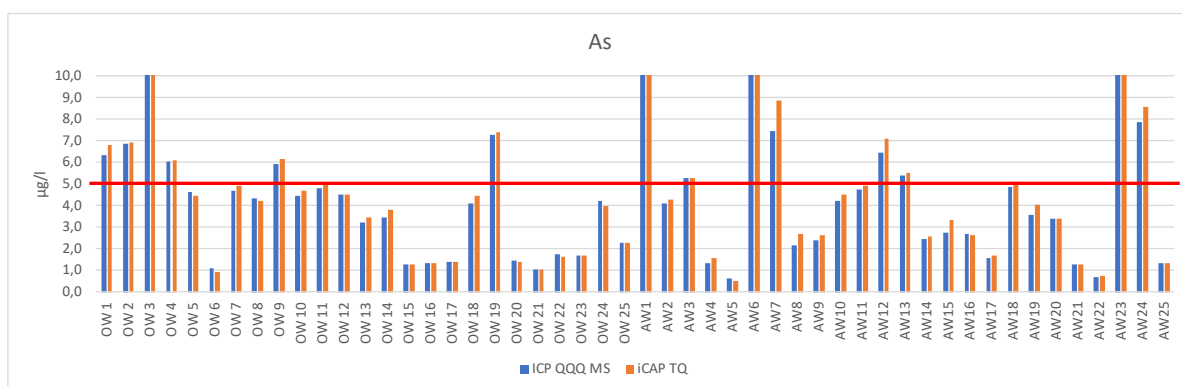
Wat betreft de significante verschillen die tussen beide instrumenten worden vastgesteld, wordt de variatie in de bepaling van Sb verondersteld te wijten te zijn aan de (in)stabiliteit van deze parameter (> 2 maand tussen analyse van dezelfde oplossingen).

De relatief grote verschillen in de metingen van Cr hangen mogelijk samen met het feit dat in de meting van de procedure blanco voor oppervlakte- en afvalwater met iCAP TQ ICP-MS resp. een gehalte van 0,12 µg/ en 0,70 µg/l werden bepaald. Indien gecorrigeerd wordt voor deze waarden, dan worden vergelijkbare gehalten bekomen.

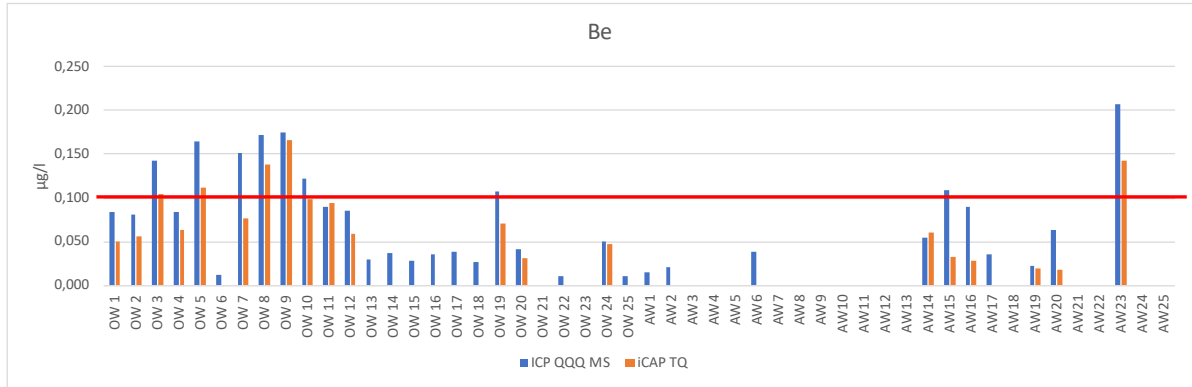
### 4.3. KRITISCHE ELEMENTEN

In Tabel 3 wordt een overzicht gegeven van concentratieniveaus van elementen in grond-, drink-, oppervlakte- en afvalwater zoals opgenomen in de Vlaamse milieuwetgeving. Als criterium voor de LOQ<sub>max</sub> wordt momenteel 30 % van de normwaarde gehanteerd.

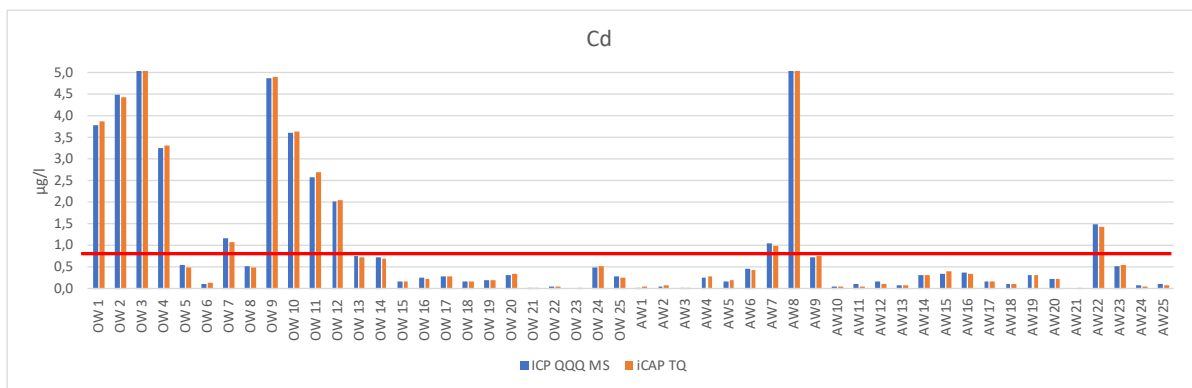
Voor de elementen As, Be, Cd, Co, Hg, Se, Tl, U, V en Ag geldt dat de in het WAC vereiste LOQ<sub>max</sub> waarde ≥ 30 % van de normwaarde. Voor deze elementen in het bijzonder werd de multi-element bepalingsmethode in meer detail geëvalueerd.



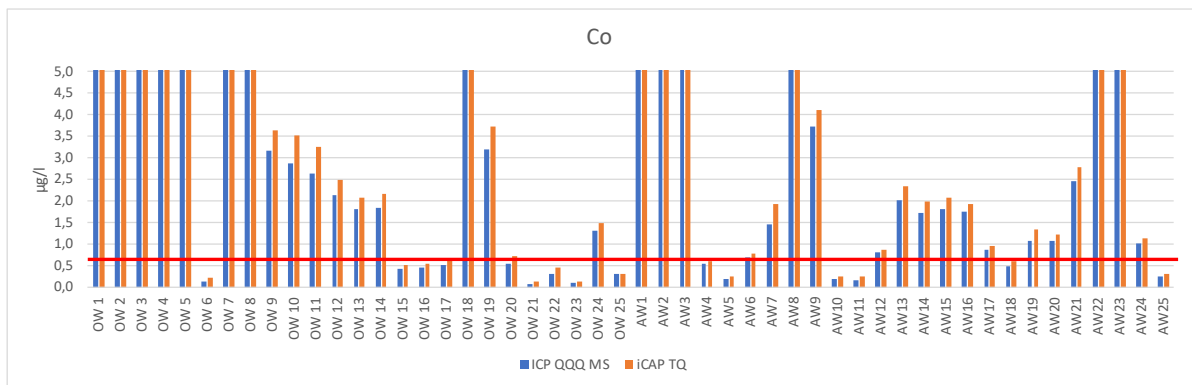
Figuur 17 : Vergelijking van meetresultaten voor As (µg/l) in 25 oppervlakte- en 25 afvalwaters met 8900 ICP-MS QQQ versus iCAP TQ ICP-MS (rode lijn is normwaarde Vlaamse wetgeving).



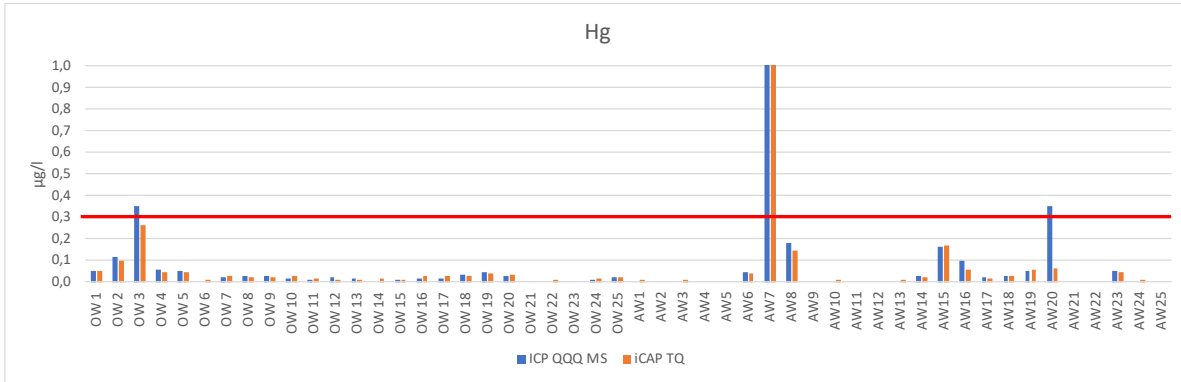
Figuur 18 : Vergelijking van meetresultaten voor Be (µg/l) in 25 oppervlakte- en 25 afvalwaters met 8900 ICP-MS QQQ versus iCAP TQ ICP-MS (rode lijn is normwaarde Vlaamse wetgeving).



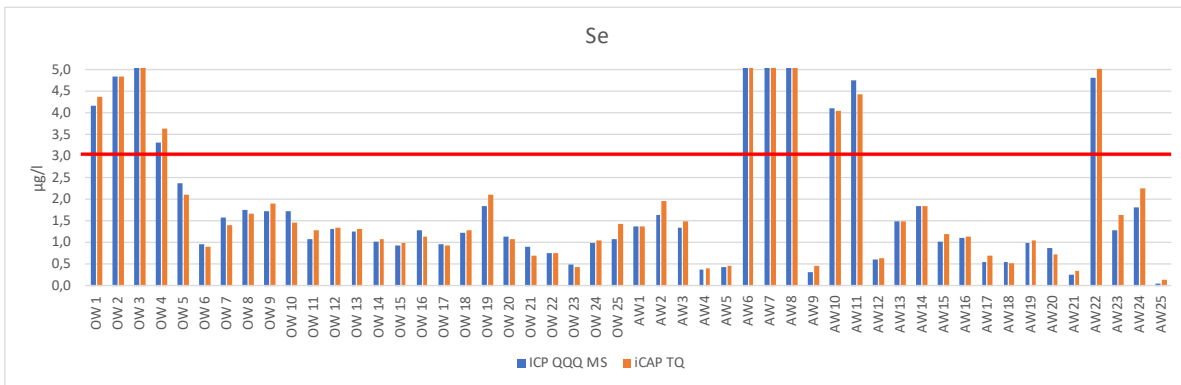
Figuur 19 : Vergelijking van meetresultaten voor Cd (µg/l) in 25 oppervlakte- en 25 afvalwaters met 8900 ICP-MS QQQ versus iCAP TQ ICP-MS (rode lijn is normwaarde Vlaamse wetgeving).



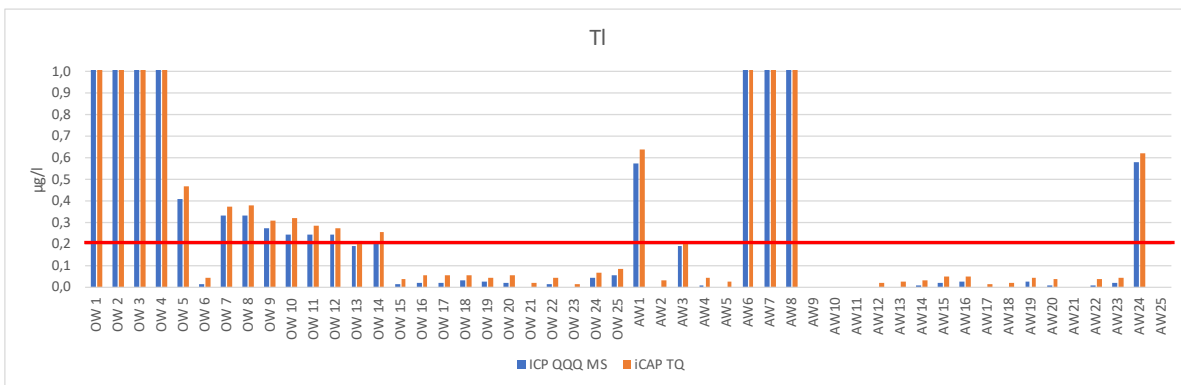
Figuur 20 : Vergelijking van meetresultaten voor Co (µg/l) in 25 oppervlakte- en 25 afvalwaters met 8900 ICP-MS QQQ versus iCAP TQ ICP-MS (rode lijn is normwaarde Vlaamse wetgeving).



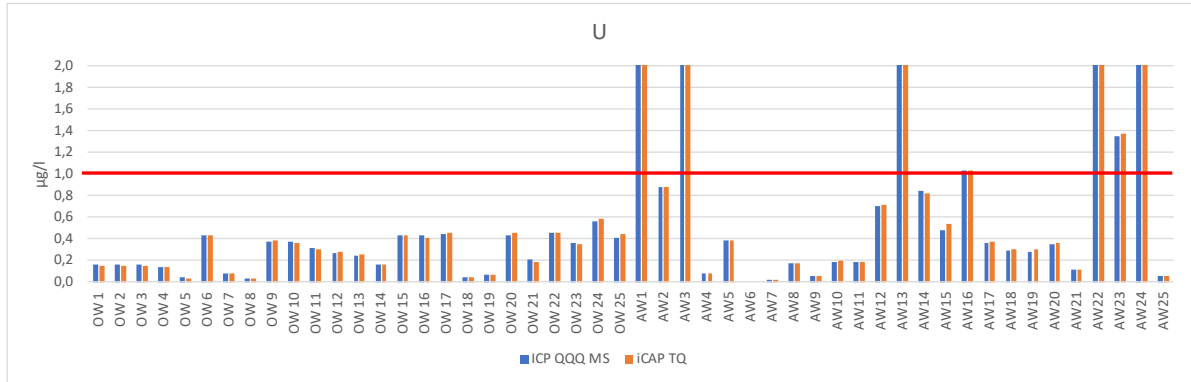
Figuur 21 : Vergelijking van meetresultaten voor Hg ( $\mu\text{g/l}$ ) in 25 oppervlakte- en 25 afvalwaters met 8900 ICP-MS QQQ versus iCAP TQ ICP-MS (rode lijn is normwaarde Vlaamse wetgeving).



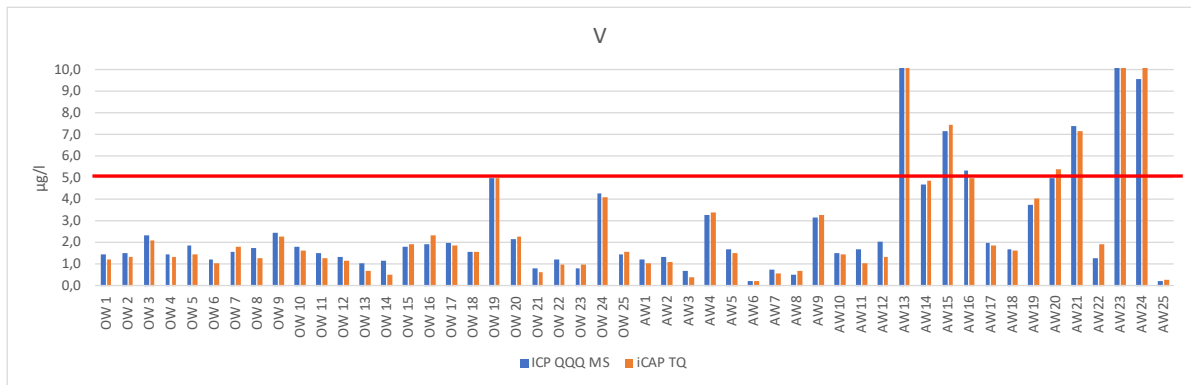
Figuur 22 : Vergelijking van meetresultaten voor Se ( $\mu\text{g/l}$ ) in 25 oppervlakte- en 25 afvalwaters met 8900 ICP-MS QQQ versus iCAP TQ ICP-MS (rode lijn is normwaarde Vlaamse wetgeving).



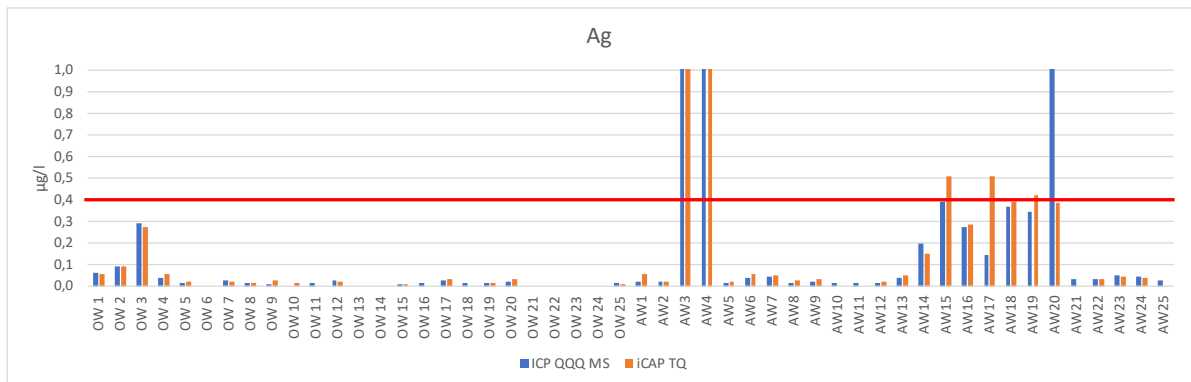
Figuur 23 : Vergelijking van meetresultaten voor Tl ( $\mu\text{g/l}$ ) in 25 oppervlakte- en 25 afvalwaters met 8900 ICP-MS QQQ versus iCAP TQ ICP-MS (rode lijn is normwaarde Vlaamse wetgeving).



**Figuur 24 :** Vergelijking van meetresultaten voor U ( $\mu\text{g/l}$ ) in 25 oppervlakte- en 25 afvalwaters met 8900 ICP-MS QQQ versus iCAP TQ ICP-MS (rode lijn is normwaarde Vlaamse wetgeving).



**Figuur 25 :** Vergelijking van meetresultaten voor V ( $\mu\text{g/l}$ ) in 25 oppervlakte- en 25 afvalwaters met 8900 ICP-MS QQQ versus iCAP TQ ICP-MS (rode lijn is normwaarde Vlaamse wetgeving).



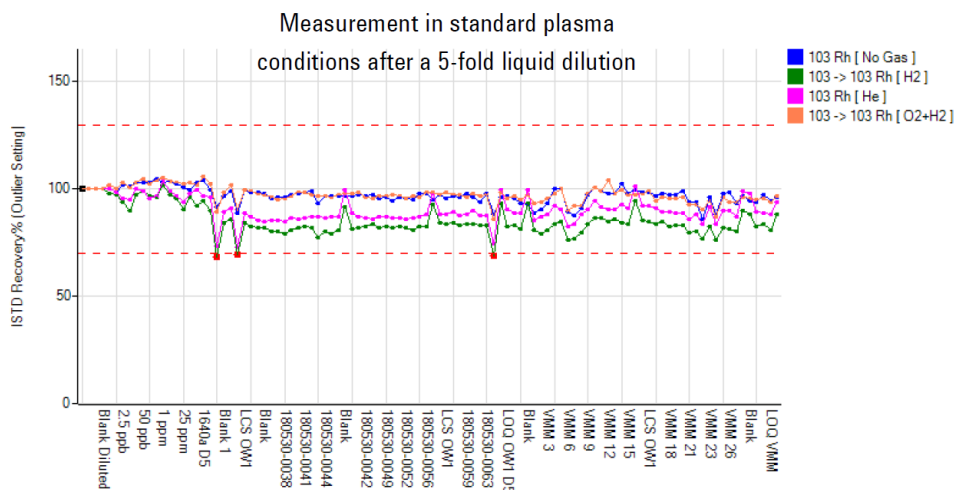
**Figuur 26 :** Vergelijking van meetresultaten voor Ag ( $\mu\text{g/l}$ ) in 25 oppervlakte- en 25 afvalwaters met 8900 ICP-MS QQQ versus iCAP TQ ICP-MS (rode lijn is normwaarde Vlaamse wetgeving).

Voor de elementen As, Cd, Hg, Se, U en V is het relatief verschil tussen de meetwaarden bepaald met 8900 ICP-MS QQQ versus iCAP TQ ICP-MS in de verschillende afval en oppervlaktewaters doorgaans  $< 10\%$ . Voor de elementen Tl en Co wordt een systematisch verschil van  $\sim 20\%$  vastgesteld. Dit is waarschijnlijk te wijten aan de kalibratie in combinatie met interne standaard correctie. Voor het

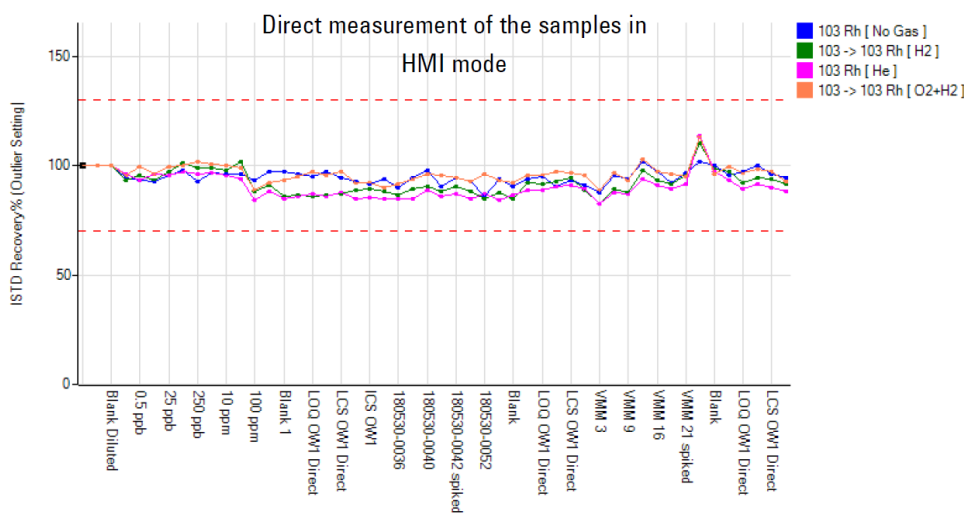
element Ag worden doorgaans vergelijkbare resultaten bekomen met beide instrumenten, in enkele monsters werden wel grote verschillen vastgesteld, dit is waarschijnlijk te wijten aan de instabiliteit van deze parameter. Voor het element Be worden de grootste verschillen vastgesteld. Dit is te wijten aan het concentratieniveau (~ 0,1 µg/l, in de 1/10 verdunning komt dit overeen met een werkelijk gemeten waarde van 10 ng/l) alsook dat voor de lichtere elementen de interne standaard correctie met Rh onvoldoende accuraat is.

**4.4. STABILITEIT / ROBUUSTHEID**

In Figuur 27, Figuur 28 en Figuur 29 is de stabiliteit tijdens de meetreeks ( ca. 8 uur) weergegeven op basis van het signaal van de interne standaard Rh.

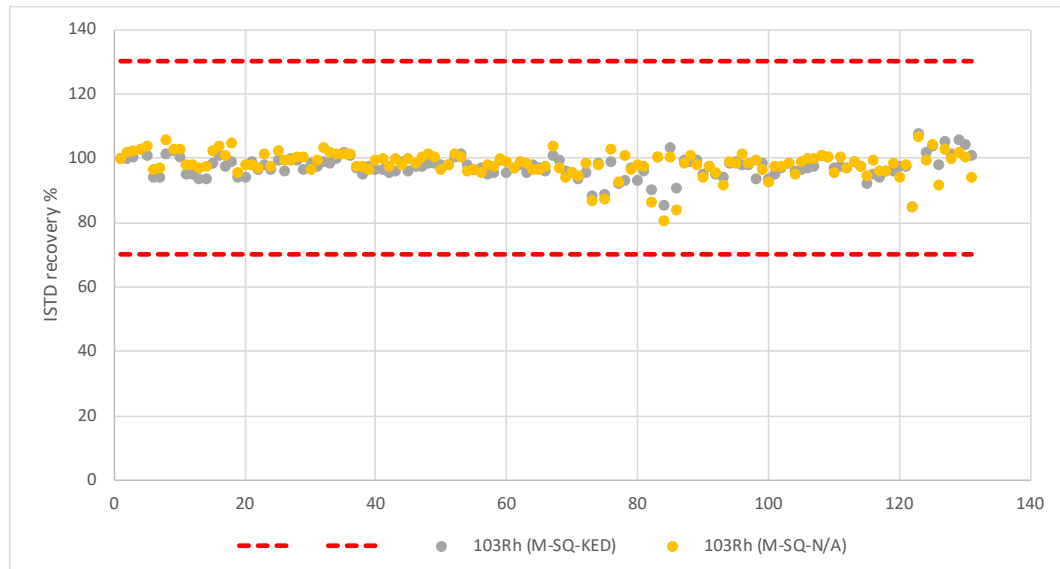


Figuur 27: ICP-QQQ-MS stabiliteit signaal interne standaard (digestie oplossing werd 5 \* verdund gemeten, totale verdunning = 10) gedurende de meetreeks (ca. 110 analyses). De rode stippellijn omvat het criterium voor terugvinding van interne standaard (+/- 30 %).



Figuur 28: ICP-QQQ-MS stabiliteit signaal interne standaard in HMI-4 mode gedurende de meetreeks. De rode stippellijn omvat het criterium voor terugvinding van interne standaard (+/- 30 %).





*Figuur 29: iCAP TQ ICP-MS stabiliteit signaal interne standaard (digestie oplossing werd 5 \* verdund gemeten, totale verdunning = 10) gedurende de meetreeks (ca. 130 analyses). De rode stippellijn omvat het criterium voor terugvinding van interne standaard (+/- 30 %).*

Zowel bij de meting van de gedigesteerde monsters in 10-voudige verdunning alsook in het geval van meting van de monsters in HMI-4 mode wordt een goede stabiliteit van het signaal gedurende de meetreeks vastgesteld. Dit wijst op de robuuste meetcondities van TQ-ICP-MS instrumenten en bevestigt de mogelijkheid tot “high throughput” analyse.

## HOOFDSTUK 5. BESLUIT

Het doel van deze studie was de haalbaarheid te evalueren van de triple quadrupole ICP-MS voor de kwantitatieve multi-element bepaling van 68 elementen (+ rhodium) in waterige milieumonsters.

H																	He	
Li	Be											B	C	N	O	F	Ne	
Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar	
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr	
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe	
Cs	Ba	La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn	
Fr	Ra	Ac																
			Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu		
			Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr		

Sinds 2017 wordt deze nieuwe generatie ICP-MS aangeboden door 2 leveranciers (Agilent en Thermo Fisher Scientific). In samenwerking met VMM en de applicatielaboratoria van deze leveranciers werd deze haalbaarheidsstudie uitgevoerd op 25 afvalwaters en 25 oppervlaktewaters.

De triple quadrupole ICP-MS biedt voor een aantal elementen (bv. Cd, Hg, As, Se, S, Si) nog meer garanties naar het verwijderen van potentieel aanwezige interferenten in vergelijking met de huidige ICP-MS instrumenten aanwezig in de meeste milieulaboratoria.

In combinatie met het gebruik van een automatisch (vb ESI prepFAST) online verdunnings systeem en/of een argon gas verdunnings systeem bij de monsterintroductie, biedt dit instrument het potentieel om alle relevante matrix- en spoorelementen in één analyse voldoende gevoelig en kwantitatief te bepalen conform de prestatie-eisen opgenomen in WAC. Een randbemerking hierbij is dat voor een aantal elementen (bv. Ag, Sb, Sn, Hg) eerder de stabiliteit/conservering een grotere invloed kan hebben op de juistheid van de resultaten dan de meting zelf.

De in dit rapport vermelde prestatiekenmerken zijn indicatief en bijkomende optimalisatie van de multi-element methode is noodzakelijk o.a. naar het gebruik van meerdere interne standaarden naast Rh (bv. <sup>6</sup>Li, Ge, Sc, Ir). Ook de keuze van (reactie) gasen in combinatie met te bepalen elementen kan nog verder geoptimaliseerd worden. Er wordt verwacht dat na optimalisatie, het mogelijk moet zijn om ook voor de elementen Ag, As, Be, Cd, Co, Hg, Se, Tl, U en V te kunnen voldoen aan de LOQ<sub>max</sub> waarde ≤ 30 % van de normwaarde. In dit geval zou voor alle elementen in de huidige milieuwetgeving kunnen voldaan worden aan de eis dat de rapportagegrens maximaal 30 % van de normwaarde mag bedragen.

Naast de kwantitatieve multi-element bepaling van 68 elementen, blijken de meetcondities van TQ-ICP-MS instrumenten voldoende robuust voor het in routine uitvoeren van “high throughput” analyse.

## LITERATUURLIJST

Method development for ultra-trace elemental and isotopic analysis using tandem ICP – mass spectrometry (ICP-MS/MS), Eduardo Bolea Fernández, Thesis submitted in fulfillment of the requirements for the degree of Doctor of Science: Chemistry, Department of Analytical Chemistry Research group : Atomic & Mass Spectrometry, Ghent University, 2017.

Thermo Scientific iCAP TQ ICP-MS, Redefining triple quadrupole technology with unique ease of use, PRODUCTION SPECIFICATIONS, ThermoScientific

Agilent, Demo Report, VITO ICP-MS/MS, Alain Desprez, ICP-MS Applications Specialist

## BIJLAGE A: MEETDATA AFVAL- EN OPPERVLAKTEWATER

ICP-QQQ-MS		OW1	OW2	OW3	OW4	OW5	OW6	OW7	OW8	OW9	OW10	OW11	OW12	OW13
7 Li [ No Gas ]	Conc. [ ppb ]	443,359	463,905	544,421	364,721	6,134	6,616	93,471	5,807	30,458	47,498	34,016	29,439	33,637
9 Be [ No Gas ]	Conc. [ ppb ]	0,084	0,081	0,142	0,083	0,165	0,011	0,152	0,172	0,175	0,122	0,089	0,085	0,029
10 B [ No Gas ]	Conc. [ ppb ]	283,983	326,820	357,359	239,314	44,664	28,442	89,306	44,076	97,545	142,435	113,867	110,119	116,000
23 Na [ He ]	Conc. [ ppm ]	334,419	378,143	426,219	284,003	22,863	24,335	89,179	22,411	29,440	32,856	29,464	29,055	35,271
24 Mg [ He ]	Conc. [ ppm ]	3,847	3,755	3,465	3,846	4,308	6,585	4,266	4,324	5,758	5,619	5,236	5,606	5,533
27 Al [ No Gas ]	Conc. [ ppb ]	272,434	415,939	1254,389	235,136	177,142	56,488	164,546	168,648	155,884	107,836	84,681	79,662	31,540
28 -> 28 Si [ H2 ]	Conc. [ ppm ]	3,989	3,848	4,440	4,055	4,701	1,345	4,325	4,702	2,549	2,378	2,550	3,097	3,559
31 -> 47 P [ O2+H2 ]	Conc. [ ppm ]	0,504	0,554	1,058	0,488	0,420	0,135	0,395	0,416	0,112	0,081	0,096	0,132	0,230
32 -> 48 S [ O2+H2 ]	Conc. [ ppm ]	109,664	122,490	136,586	94,098	15,738	13,616	35,025	15,662	35,770	46,635	37,116	33,257	33,940
39 -> 39 K [ O2+H2 ]	Conc. [ ppm ]	225,704	269,121	289,004	191,615	11,459	3,916	57,726	11,493	7,792	8,032	8,752	8,869	10,393
40 -> 40 Ca [ O2+H2 ]	Conc. [ ppm ]	45,723	48,759	47,955	42,598	25,637	64,374	29,865	25,592	73,335	86,547	70,721	65,918	64,494
45 -> 61 Sc [ O2+H2 ]	Conc. [ ppb ]	0,021	0,031	0,073	0,024	0,047	0,003	0,032	0,049	0,031	0,022	0,032	0,022	0,011
47 -> 63 Ti [ O2+H2 ]	Conc. [ ppb ]	0,784	1,482	5,900	1,070	2,355	1,045	1,599	2,227	1,674	1,130	0,892	1,002	0,518
51 -> 67 V [ O2+H2 ]	Conc. [ ppb ]	1,451	1,538	2,311	1,443	1,874	1,242	1,601	1,732	2,461	1,804	1,498	1,340	1,060
52 Cr [ He ]	Conc. [ ppb ]	2,092	5,693	14,292	1,348	1,428	0,393	0,772	0,773	4,511	0,646	0,438	0,547	1,739
55 -> 55 Mn [ O2+H2 ]	Conc. [ ppb ]	56,810	57,742	62,684	64,283	114,893	17,655	97,082	111,866	199,107	189,696	144,553	127,865	99,956
56 -> 56 Fe [ H2 ]	Conc. [ ppb ]	276,863	424,596	1322,148	668,124	2874,577	88,780	2006,851	2680,253	2664,208	1872,700	1755,637	2198,574	986,652
59 Co [ He ]	Conc. [ ppb ]	5,831	5,590	6,681	5,811	6,923	0,136	6,283	6,588	3,157	2,885	2,635	2,155	1,812
60 -> 60 Ni [ O2+H2 ]	Conc. [ ppb ]	10,353	13,592	19,176	10,525	16,332	1,664	13,028	15,526	7,105	5,028	5,635	4,768	6,459
65 Cu [ He ]	Conc. [ ppb ]	4,669	5,792	17,784	3,952	4,979	2,120	3,748	4,859	2,957	2,287	2,571	2,514	1,649
66 -> 66 Zn [ O2+H2 ]	Conc. [ ppb ]	238,743	245,791	408,890	211,572	85,847	7,313	110,630	80,962	2028,780	1986,991	1400,044	1037,224	499,644
71 -> 71 Ga [ O2+H2 ]	Conc. [ ppb ]	0,127	0,183	0,356	0,121	0,096	0,123	0,089	0,101	0,105	0,080	0,064	0,075	0,060
72 Ge [ He ]	Conc. [ ppb ]	0,121	0,121	0,174	0,093	0,067	0,101	0,049	0,075	0,084	0,040	0,170	0,152	0,031
75 -> 91 As [ O2+H2 ]	Conc. [ ppb ]	6,337	6,876	10,134	6,021	4,618	1,074	4,700	4,361	5,903	4,486	4,840	4,499	3,224
78 -> 94 Se [ O2+H2 ]	Conc. [ ppb ]	4,183	4,850	5,722	3,320	2,382	0,955	1,589	1,766	1,717	1,735	1,076	1,319	1,255
85 Rb [ He ]	Conc. [ ppb ]	905,978	1084,893	1175,179	753,070	10,528	4,203	200,201	10,327	16,866	22,401	18,366	15,846	18,154
88 Sr [ He ]	Conc. [ ppb ]	158,156	168,678	170,773	143,677	88,545	169,961	103,928	85,708	233,715	290,361	237,844	218,775	200,642
89 -> 105 Y [ O2+H2 ]	Conc. [ ppb ]	0,528	0,629	1,451	0,587	1,028	0,062	0,824	0,942	0,798	0,590	0,459	0,390	0,172
90 Zr [ He ]	Conc. [ ppb ]	0,047	0,102	0,165	0,066	0,104	0,034	0,074	0,127	0,104	0,099	0,080	0,080	0,011
93 -> 125 Nb [ O2+H2 ]	Conc. [ ppb ]	0,009	0,013	0,030	0,008	0,015	0,005	0,011	0,015	0,012	0,008	0,005	0,007	0,005
95 Mo [ He ]	Conc. [ ppb ]	16,121	19,258	21,619	13,347	0,742	1,846	3,791	0,580	2,805	2,496	2,130	1,901	1,810
99 Ru [ He ]	Conc. [ ppb ]	<0.000	<0.000	<0.000	<0.000	<0.000	<0.000	<0.000	<0.000	<0.000	<0.000	<0.000	<0.000	<0.000
105 Pd [ He ]	Conc. [ ppb ]	0,025	0,035	0,028	0,022	0,016	0,023	0,013	0,009	0,013	0,015	0,017	0,021	0,012
107 Ag [ He ]	Conc. [ ppb ]	0,064	0,092	0,291	0,038	0,018	0,004	0,027	0,015	0,011	0,007	0,013	0,028	0,001
111 -> 111 Cd [ O2+H2 ]	Conc. [ ppb ]	3,784	4,509	8,701	3,259	0,538	0,114	1,162	0,520	4,878	3,603	2,592	2,032	0,751
115 -> 115 In [ O2+H2 ]	Conc. [ ppb ]	0,014	0,029	0,105	0,014	0,005	0,002	0,003	0,003	0,007	0,004	0,011	0,011	0,004
118 -> 118 Sn [ O2+H2 ]	Conc. [ ppb ]	0,211	0,251	1,434	0,139	0,285	0,043	0,138	0,157	0,128	0,037	0,082	0,114	0,050
121 -> 121 Sb [ O2+H2 ]	Conc. [ ppb ]	1,278	1,408	1,815	1,214	0,791	0,579	0,886	0,808	1,892	2,515	2,451	2,214	1,983

ICP-QQQ-MS		OW1	OW2	OW3	OW4	OW5	OW6	OW7	OW8	OW9	OW10	OW11	OW12	OW13
125 -> 125 Te [ O2+H2 ]	Conc. [ ppb ]	0,117	0,082	0,132	0,161	0,093	0,107	0,152	0,117	0,153	0,161	0,166	0,181	0,116
133 Cs [ He ]	Conc. [ ppb ]	133,709	160,664	173,377	110,252	0,136	0,152	28,715	0,086	6,412	9,394	6,613	5,238	6,173
135 Ba [ He ]	Conc. [ ppb ]	30,226	33,861	48,256	29,020	29,853	21,578	28,363	27,622	34,215	36,277	34,134	33,053	25,016
139 La [ He ]	Conc. [ ppb ]	0,424	0,538	1,486	0,483	0,927	0,077	0,723	0,793	1,077	0,775	0,595	0,450	0,158
140 Ce [ He ]	Conc. [ ppb ]	0,841	1,029	3,009	0,948	1,889	0,133	1,405	1,668	1,962	1,440	1,112	0,916	0,318
141 Pr [ He ]	Conc. [ ppb ]	0,107	0,147	0,401	0,117	0,235	0,021	0,180	0,208	0,185	0,128	0,105	0,079	0,030
146 Nd [ He ]	Conc. [ ppb ]	0,467	0,589	1,595	0,543	0,981	0,076	0,831	0,913	0,743	0,540	0,500	0,369	0,124
147 Sm [ He ]	Conc. [ ppb ]	0,107	0,140	0,372	0,102	0,226	0,014	0,152	0,182	0,135	0,107	0,071	0,065	0,033
151 Eu [ He ]	Conc. [ ppb ]	0,024	0,031	0,090	0,017	0,052	0,003	0,039	0,039	0,035	0,022	0,024	0,019	0,006
155 Gd [ He ]	Conc. [ ppb ]	0,160	0,190	0,441	0,201	0,336	0,045	0,237	0,283	0,199	0,152	0,112	0,093	0,107
159 Tb [ He ]	Conc. [ ppb ]	0,017	0,017	0,043	0,016	0,034	0,004	0,025	0,030	0,022	0,017	0,014	0,013	0,003
161 Dy [ He ]	Conc. [ ppb ]	0,088	0,121	0,241	0,104	0,196	0,010	0,148	0,165	0,105	0,085	0,069	0,050	0,020
165 Ho [ He ]	Conc. [ ppb ]	0,016	0,022	0,049	0,022	0,032	0,002	0,025	0,029	0,025	0,018	0,012	0,013	0,007
166 Er [ He ]	Conc. [ ppb ]	0,051	0,061	0,139	0,052	0,092	0,007	0,071	0,083	0,057	0,044	0,037	0,040	0,016
169 Tm [ He ]	Conc. [ ppb ]	0,007	0,009	0,018	0,006	0,013	0,001	0,008	0,015	0,009	0,008	0,007	0,005	0,004
172 Yb [ He ]	Conc. [ ppb ]	0,051	0,068	0,099	0,048	0,076	0,011	0,068	0,061	0,045	0,037	0,034	0,035	0,028
175 Lu [ He ]	Conc. [ ppb ]	0,009	0,009	0,016	0,009	0,012	0,001	0,011	0,010	0,007	0,005	0,006	0,006	0,003
178 Hf [ He ]	Conc. [ ppb ]	0,004	0,005	0,003	0,002	0,001	0,001	0,003	0,004	0,004	0,002	0,001	0,001	0,002
181 Ta [ He ]	Conc. [ ppb ]	0,001	0,001	0,002	0,001	0,001	0,001	0,001	0,001	0,001	0,000	0,000	0,000	0,000
182 W [ He ]	Conc. [ ppb ]	4,438	4,800	5,658	3,639	0,049	0,268	0,968	0,030	0,185	0,154	0,124	0,113	0,084
185 Re [ He ]	Conc. [ ppb ]	1,169	1,433	1,526	0,977	0,012	0,020	0,249	0,012	0,290	0,455	0,302	0,248	0,256
191 Ir [ No Gas ]	Conc. [ ppb ]	0,067	0,053	0,090	0,182	0,058	0,051	0,060	0,067	0,055	0,060	0,050	0,049	0,050
195 Pt [ He ]	Conc. [ ppb ]	<0.000	<0.000	<0.000	<0.000	<0.000	<0.000	<0.000	<0.000	<0.000	<0.000	<0.000	<0.000	<0.000
197 Au [ No Gas ]	Conc. [ ppb ]	0,291	0,274	0,285	0,255	0,190	0,180	0,150	0,158	0,138	0,120	0,130	0,058	0,057
201 -> 201 Hg [ O2+H2 ]	Conc. [ ppb ]	0,051	0,118	0,349	0,057	0,053	0,000	0,021	0,027	0,029	0,014	0,013	0,021	0,016
203 Tl [ He ]	Conc. [ ppb ]	1,511	1,421	2,939	1,096	0,412	0,018	0,335	0,331	0,273	0,247	0,246	0,243	0,194
208 Pb [ He ]	Conc. [ ppb ]	4,291	8,256	31,393	3,673	1,872	0,679	1,970	1,528	4,522	2,878	3,917	3,880	1,160
209 Bi [ He ]	Conc. [ ppb ]	0,133	0,244	1,000	0,127	0,076	0,016	0,077	0,072	0,023	0,021	0,023	0,022	0,012
232 Th [ No Gas ]	Conc. [ ppb ]	0,015	0,022	0,025	0,011	0,035	0,009	0,024	0,034	0,012	0,021	0,017	0,015	0,002
238 U [ He ]	Conc. [ ppb ]	0,159	0,167	0,160	0,141	0,038	0,436	0,081	0,029	0,375	0,371	0,320	0,269	0,242

Bijlage A: meetdata afval- en oppervlaktewater

ICP-QQQ-MS		OW14	OW15	OW16	OW17	OW18	OW19	OW20	OW21	OW22	OW23	OW24	OW25
7 Li [ No Gas ]	Conc. [ ppb ]	27,615	6,849	7,150	7,303	660,217	3,911	7,175	2,395	5,426	6,029	5,474	6,927
9 Be [ No Gas ]	Conc. [ ppb ]	0,037	0,028	0,036	0,039	0,027	0,108	0,041	0,005	0,010	0,004	0,049	0,010
10 B [ No Gas ]	Conc. [ ppb ]	106,986	31,319	29,621	30,222	57,370	15,511	34,674	39,610	31,889	52,895	40,019	36,306
23 Na [ He ]	Conc. [ ppm ]	34,896	27,482	27,447	27,218	152,078	10,742	27,520	24,967	27,995	23,728	29,138	25,091
24 Mg [ He ]	Conc. [ ppm ]	5,237	7,252	7,365	7,363	3,275	3,253	7,427	4,931	6,657	4,889	6,967	7,520
27 Al [ No Gas ]	Conc. [ ppb ]	49,455	251,058	361,967	418,007	196,340	131,690	477,865	45,460	37,253	19,321	129,383	123,219
28 -> 28 Si [ H2 ]	Conc. [ ppm ]	4,133	1,671	1,979	2,049	5,522	2,527	2,158	0,883	0,917	0,381	1,946	1,478
31 -> 47 P [ O2+H2 ]	Conc. [ ppm ]	0,219	0,144	0,155	0,153	0,584	0,047	0,165	0,014	0,071	0,021	0,116	0,149
32 -> 48 S [ O2+H2 ]	Conc. [ ppm ]	30,387	14,025	13,840	13,615	105,074	23,312	14,066	11,376	13,894	11,603	16,206	13,197
39 -> 39 K [ O2+H2 ]	Conc. [ ppm ]	12,208	9,540	9,722	9,115	48,978	9,210	8,860	4,482	6,610	5,261	8,095	7,562
40 -> 40 Ca [ O2+H2 ]	Conc. [ ppm ]	57,563	65,654	65,442	64,990	25,116	29,233	64,914	36,177	56,704	39,716	56,246	62,076
45 -> 61 Sc [ O2+H2 ]	Conc. [ ppb ]	0,017	0,044	0,079	0,097	0,040	0,100	0,098	0,016	0,001	<0.000	0,039	0,014
47 -> 63 Ti [ O2+H2 ]	Conc. [ ppb ]	0,817	3,824	5,372	5,768	0,836	1,563	7,038	0,706	0,655	0,138	1,658	1,812
51 -> 67 V [ O2+H2 ]	Conc. [ ppb ]	1,164	1,785	1,931	1,994	1,597	4,968	2,169	0,787	1,192	0,792	4,287	1,441
52 Cr [ He ]	Conc. [ ppb ]	0,441	0,801	2,045	1,503	2,332	4,950	1,597	0,340	0,020	0,318	2,271	0,837
55 -> 55 Mn [ O2+H2 ]	Conc. [ ppb ]	98,135	49,093	41,088	46,088	68,359	85,177	49,630	68,197	20,814	10,717	39,539	24,864
56 -> 56 Fe [ H2 ]	Conc. [ ppb ]	1045,216	359,276	528,095	590,534	334,514	2609,313	644,623	206,282	71,923	52,754	782,419	195,284
59 Co [ He ]	Conc. [ ppb ]	1,854	0,423	0,469	0,523	5,543	3,198	0,539	0,086	0,324	0,102	1,331	0,314
60 -> 60 Ni [ O2+H2 ]	Conc. [ ppb ]	5,667	1,928	2,570	2,395	13,998	10,050	2,531	1,110	2,005	1,458	3,381	1,878
65 Cu [ He ]	Conc. [ ppb ]	1,601	2,721	3,428	3,375	3,093	3,600	3,708	0,539	2,124	1,522	2,706	3,916
66 -> 66 Zn [ O2+H2 ]	Conc. [ ppb ]	456,599	17,075	25,083	24,776	54,549	32,985	29,625	1,376	6,349	1,664	74,809	29,737
71 -> 71 Ga [ O2+H2 ]	Conc. [ ppb ]	0,051	0,153	0,156	0,200	0,098	0,068	0,203	0,045	0,071	0,064	0,087	0,089
72 Ge [ He ]	Conc. [ ppb ]	0,040	0,118	<0.000	0,109	0,031	0,107	0,046	0,014	0,065	0,028	0,072	0,049
75 -> 91 As [ O2+H2 ]	Conc. [ ppb ]	3,438	1,308	1,343	1,402	4,083	7,273	1,440	1,022	1,779	1,671	4,219	2,274
78 -> 94 Se [ O2+H2 ]	Conc. [ ppb ]	1,033	0,938	1,282	0,963	1,236	1,850	1,154	0,892	0,764	0,497	0,991	1,092
85 Rb [ He ]	Conc. [ ppb ]	17,576	5,179	5,381	5,184	22,530	10,654	5,367	5,222	4,865	6,680	6,873	4,648
88 Sr [ He ]	Conc. [ ppb ]	175,921	172,110	171,799	172,264	68,631	101,107	171,550	109,813	158,960	124,545	162,347	173,240
89 -> 105 Y [ O2+H2 ]	Conc. [ ppb ]	0,193	0,330	0,401	0,446	0,494	1,546	0,527	0,058	0,064	0,031	0,437	0,160
90 Zr [ He ]	Conc. [ ppb ]	0,062	0,139	0,159	0,267	0,106	0,333	0,312	0,100	0,018	<0.000	0,140	0,078
93 -> 125 Nb [ O2+H2 ]	Conc. [ ppb ]	0,006	0,018	0,025	0,024	0,007	0,016	0,029	0,008	0,005	0,002	0,013	0,010
95 Mo [ He ]	Conc. [ ppb ]	1,598	1,955	2,094	1,973	2,416	1,553	2,013	0,949	1,930	2,156	1,762	1,841
99 Ru [ He ]	Conc. [ ppb ]	<0.000	<0.000	<0.000	<0.000	<0.000	<0.000	<0.000	<0.000	<0.000	<0.000	<0.000	<0.000
105 Pd [ He ]	Conc. [ ppb ]	0,011	0,007	0,008	0,009	0,009	0,011	0,008	0,006	0,006	0,007	0,007	0,006
107 Ag [ He ]	Conc. [ ppb ]	0,009	0,011	0,017	0,029	0,014	0,018	0,022	0,001	0,004	0,000	0,007	0,017
111 -> 111 Cd [ O2+H2 ]	Conc. [ ppb ]	0,723	0,168	0,247	0,286	0,161	0,189	0,319	0,022	0,044	0,006	0,506	0,278
115 -> 115 In [ O2+H2 ]	Conc. [ ppb ]	0,005	0,006	0,005	0,004	0,003	0,001	0,006	<0.000	<0.000	<0.000	0,005	0,002
118 -> 118 Sn [ O2+H2 ]	Conc. [ ppb ]	0,052	0,172	0,324	0,268	0,138	0,022	0,316	0,116	<0.000	<0.000	0,105	0,188
121 -> 121 Sb [ O2+H2 ]	Conc. [ ppb ]	1,656	0,591	0,573	0,556	0,921	0,751	0,583	0,417	0,546	0,605	0,676	0,595
125 -> 125 Te [ O2+H2 ]	Conc. [ ppb ]	0,086	0,080	0,140	0,130	0,051	0,078	0,080	0,108	0,088	0,136	0,116	0,159
133 Cs [ He ]	Conc. [ ppb ]	4,936	0,212	0,249	0,238	0,135	0,019	0,253	0,036	0,110	0,060	0,146	0,182

ICP-QQQ-MS		OW14	OW15	OW16	OW17	OW18	OW19	OW20	OW21	OW22	OW23	OW24	OW25
135 Ba [ He ]	Conc. [ ppb ]	25,996	24,448	24,187	24,452	15,854	72,597	25,523	24,014	27,160	27,462	41,869	23,454
139 La [ He ]	Conc. [ ppb ]	0,179	0,386	0,561	0,573	0,330	0,696	0,700	0,029	0,049	0,019	0,346	0,177
140 Ce [ He ]	Conc. [ ppb ]	0,361	0,740	1,046	1,100	0,779	1,820	1,416	0,101	0,095	0,029	0,723	0,344
141 Pr [ He ]	Conc. [ ppb ]	0,040	0,092	0,126	0,128	0,103	0,245	0,178	0,011	0,010	0,004	0,080	0,035
146 Nd [ He ]	Conc. [ ppb ]	0,146	0,356	0,559	0,567	0,467	1,190	0,683	0,047	0,062	0,022	0,400	0,185
147 Sm [ He ]	Conc. [ ppb ]	0,029	0,091	0,103	0,124	0,110	0,285	0,115	0,020	0,015	0,004	0,067	0,028
151 Eu [ He ]	Conc. [ ppb ]	0,008	0,019	0,024	0,027	0,022	0,058	0,027	0,002	0,003	0,002	0,016	0,008
155 Gd [ He ]	Conc. [ ppb ]	0,106	0,099	0,124	0,132	0,274	0,334	0,147	0,029	0,029	0,027	0,122	0,051
159 Tb [ He ]	Conc. [ ppb ]	0,005	0,010	0,013	0,015	0,016	0,043	0,017	0,002	0,002	0,001	0,011	0,005
161 Dy [ He ]	Conc. [ ppb ]	0,027	0,072	0,078	0,091	0,078	0,219	0,108	0,013	0,008	0,010	0,069	0,026
165 Ho [ He ]	Conc. [ ppb ]	0,007	0,013	0,012	0,015	0,018	0,050	0,019	0,002	0,003	0,002	0,014	0,007
166 Er [ He ]	Conc. [ ppb ]	0,019	0,032	0,037	0,036	0,051	0,143	0,041	0,008	0,006	0,007	0,035	0,015
169 Tm [ He ]	Conc. [ ppb ]	0,003	0,004	0,005	0,005	0,007	0,025	0,007	0,001	0,002	0,001	0,004	0,002
172 Yb [ He ]	Conc. [ ppb ]	0,029	0,022	0,031	0,032	0,045	0,150	0,029	0,008	0,006	0,015	0,039	0,018
175 Lu [ He ]	Conc. [ ppb ]	0,003	0,004	0,005	0,004	0,007	0,027	0,005	0,003	0,000	0,002	0,010	0,002
178 Hf [ He ]	Conc. [ ppb ]	0,002	0,003	0,006	0,008	0,005	0,012	0,011	0,000	0,001	<0.000	0,003	0,004
181 Ta [ He ]	Conc. [ ppb ]	0,000	0,001	0,002	0,001	0,000	0,001	0,001	<0.000	0,000	0,001	0,001	0,000
182 W [ He ]	Conc. [ ppb ]	0,069	0,301	0,283	0,295	0,412	0,074	0,297	0,070	0,231	0,134	0,175	0,295
185 Re [ He ]	Conc. [ ppb ]	0,203	0,025	0,026	0,024	0,010	0,006	0,026	0,009	0,023	0,010	0,037	0,019
191 Ir [ No Gas ]	Conc. [ ppb ]	0,056	0,052	0,051	0,056	0,050	0,047	0,056	0,052	0,053	0,059	0,063	0,060
195 Pt [ He ]	Conc. [ ppb ]	<0.000	<0.000	<0.000	<0.000	<0.000	<0.000	<0.000	<0.000	<0.000	<0.000	<0.000	<0.000
197 Au [ No Gas ]	Conc. [ ppb ]	0,039	0,039	0,037	0,029	0,024	0,012	0,008	0,003	0,006	<0.000	<0.000	<0.000
201 -> 201 Hg [ O2+H2 ]	Conc. [ ppb ]	0,005	0,011	0,017	0,018	0,032	0,044	0,030	0,009	0,006	0,002	0,011	0,022
203 Tl [ He ]	Conc. [ ppb ]	0,214	0,016	0,019	0,024	0,035	0,026	0,023	<0.000	0,019	<0.000	0,045	0,057
208 Pb [ He ]	Conc. [ ppb ]	1,382	4,028	4,994	5,639	1,382	1,449	6,348	<0.000	0,351	<0.000	4,566	4,623
209 Bi [ He ]	Conc. [ ppb ]	0,022	0,036	0,053	0,056	0,089	0,014	0,068	0,005	0,007	0,003	0,021	0,029
232 Th [ No Gas ]	Conc. [ ppb ]	0,011	0,048	0,040	0,086	0,023	0,030	0,110	0,022	0,003	0,001	0,016	0,014
238 U [ He ]	Conc. [ ppb ]	0,157	0,434	0,433	0,440	0,047	0,062	0,428	0,205	0,459	0,363	0,556	0,408

Bijlage A: meetdata afval- en oppervlaktewater

iCAP TQ ICP-MS		OW1	OW2	OW3	OW4	OW5	OW6	OW7	OW8	OW9	OW10	OW11	OW12	OW13
7Li (M-SQ-N/A)	Conc. [ ppb ]	469,827	496,490	583,309	395,789	5,741	6,514	108,273	5,322	32,889	51,500	37,145	30,858	34,844
9Be (M-SQ-N/A)	Conc. [ ppb ]	0,050	0,055	0,104	0,063	0,112	-0,007	0,077	0,138	0,167	0,099	0,094	0,059	-0,029
11B (M-SQ-N/A)	Conc. [ ppb ]	320,141	372,216	400,103	276,525	44,198	28,632	105,627	43,183	112,012	158,444	122,924	105,510	121,279
23Na (M-SQ-KED)	Conc. [ ppm ]	363,668	414,580	445,520	309,215	24,576	26,861	99,601	24,661	29,939	33,678	30,024	28,359	34,212
24Mg (M-SQ-KED)	Conc. [ ppm ]	4,320	4,092	3,749	4,389	4,850	7,452	4,854	4,844	6,249	6,225	5,634	5,731	5,538
27Al (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	284,530	450,437	1300,136	255,690	197,922	64,187	204,559	195,694	166,614	125,803	87,658	86,444	32,415
28Si   28Si.18O (M-TQ-O2)	Conc. [ ppm ]	4,373	4,077	5,197	4,214	5,029	1,450	4,364	4,578	2,412	2,295	2,666	3,191	3,469
31P   31P.16O (M-TQ-O2)	Conc. [ ppm ]	0,578	0,622	1,206	0,555	0,451	0,153	0,441	0,432	0,119	0,087	0,106	0,128	0,232
32S   32S.16O (M-TQ-O2)	Conc. [ ppm ]	115,457	126,200	143,438	98,136	14,296	12,613	35,962	13,867	34,671	45,909	36,494	29,843	31,817
39K (M-SQ-KED)	Conc. [ ppm ]	232,214	265,579	293,971	193,482	10,858	3,811	59,083	10,864	7,411	7,952	8,556	8,388	9,767
44Ca (M-SQ-KED)	Conc. [ ppm ]	46,759	49,371	48,654	44,126	24,856	64,872	31,405	25,558	71,876	87,087	71,151	63,510	65,734
45Sc (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	-0,498	-0,430	-0,269	-0,523	-0,585	-0,712	-0,601	-0,450	-0,682	-0,497	-0,759	-0,683	-0,807
49Ti (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	5,528	2,940	9,697	4,256	6,080	3,487	13,769	5,379	4,524	5,319	2,251	5,225	4,124
51V (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	1,244	1,323	2,101	1,326	1,435	1,067	1,816	1,289	2,260	1,645	1,290	1,173	0,694
52Cr (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	2,625	6,983	16,926	1,665	1,679	0,825	1,255	1,390	5,763	0,797	0,818	0,736	1,958
55Mn (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	62,559	61,698	68,984	70,393	121,117	19,337	110,689	117,816	206,344	191,399	153,706	139,660	107,144
56Fe (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	284,616	429,419	1239,867	635,795	2715,576	89,910	1983,023	2480,309	2696,850	1776,750	1640,424	2118,231	929,864
59Co (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	6,380	6,533	8,159	6,584	7,909	0,240	7,337	7,492	3,643	3,510	3,253	2,482	2,087
60Ni (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	11,954	14,995	22,123	12,780	18,211	1,964	15,183	17,056	8,524	5,845	5,943	5,677	7,490
63Cu (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	4,670	6,121	19,925	4,293	5,321	2,170	4,171	5,545	3,316	2,771	2,963	2,701	1,873
66Zn (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	270,479	265,486	451,630	238,977	95,332	8,741	126,516	91,229	2211,653	2055,429	1410,048	1200,660	548,920
71Ga (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	0,021	0,232	0,360	0,116	0,236	0,020	0,050	0,095	0,051	0,069	0,001	-0,045	-0,030
74Ge (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]													
75As (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	6,796	6,939	10,988	6,109	4,456	0,952	4,919	4,240	6,184	4,682	5,073	4,503	3,438
80Se   80Se.16O (M-TQ-O2)	Conc. [ ppb ]	4,363	4,856	6,038	3,654	2,110	0,897	1,419	1,656	1,902	1,478	1,296	1,360	1,309
85Rb (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	1019,437	1210,531	1325,885	852,913	11,095	4,362	229,493	11,628	18,632	26,222	20,558	18,115	20,288
88Sr (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	177,326	189,434	187,098	165,550	97,286	193,598	117,515	99,206	263,966	337,254	270,075	240,361	223,908
89Y (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	0,558	0,671	1,481	0,670	1,010	0,063	0,913	1,130	0,953	0,646	0,523	0,369	0,174
90Zr (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	0,042	0,114	0,108	0,043	0,141	0,021	0,104	0,108	0,112	0,092	0,126	0,070	0,028
93Nb (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	0,023	0,035	0,036	0,017	0,015	0,008	0,014	0,028	0,019	0,010	0,008	0,006	0,008
98Mo (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	16,095	19,649	21,725	13,456	0,780	1,943	4,034	0,641	2,785	2,543	2,225	1,948	1,903
101Ru (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	0,004	0,004	0,000	0,000	0,004	0,004	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
105Pd (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	0,020	0,006	0,025	0,016	0,015	0,004	0,013	0,006	0,004	0,016	0,025	0,016	0,027
107Ag (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	0,059	0,093	0,278	0,056	0,023	0,004	0,022	0,017	0,029	0,019	0,007	0,021	0,007
111Cd   111Cd (M-TQ-O2)	Conc. [ ppb ]	3,878	4,447	8,442	3,315	0,483	0,144	1,087	0,489	4,902	3,641	2,695	2,050	0,738
115In (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	0,019	0,030	0,127	0,013	0,007	0,003	0,000	0,004	0,007	0,009	0,019	0,011	0,005
118Sn (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	0,348	0,224	1,692	0,117	0,375	0,079	0,140	0,141	0,130	0,156	0,173	0,100	0,102
121Sb (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	1,723	1,317	1,757	1,373	0,802	0,504	0,782	0,371	1,491	1,742	1,796	1,108	1,183
125Te (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	-0,079	-0,079	-0,079	-0,079	-0,002	-0,079	-0,079	-0,079	-0,079	-0,079	-0,079	-0,079	-0,079
133Cs (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	152,155	181,148	193,724	125,790	0,091	0,163	33,190	0,094	7,758	11,140	7,527	5,800	7,360
138Ba (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	33,021	35,049	50,491	31,198	31,545	22,933	30,683	30,610	37,796	40,093	37,237	35,633	27,546



iCAP TQ ICP-MS		OW1	OW2	OW3	OW4	OW5	OW6	OW7	OW8	OW9	OW10	OW11	OW12	OW13
139La (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	0,545	0,590	1,644	0,544	1,021	0,089	0,796	0,901	1,256	0,957	0,654	0,537	0,178
140Ce (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	0,870	1,143	3,256	1,055	2,115	0,142	1,566	1,873	2,290	1,615	1,238	1,022	0,335
141Pr (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	0,105	0,156	0,396	0,144	0,233	0,017	0,207	0,238	0,219	0,150	0,147	0,093	0,045
146Nd (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	0,501	0,537	1,711	0,619	1,059	0,089	0,851	1,027	0,743	0,518	0,418	0,320	0,139
149Sm (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	0,136	0,147	0,322	0,132	0,230	0,004	0,171	0,195	0,120	0,098	0,085	0,056	0,026
153Eu (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	0,030	0,045	0,086	0,031	0,035	0,004	0,044	0,055	0,038	0,032	0,021	0,020	0,011
157Gd (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	0,215	0,161	0,476	0,188	0,312	0,033	0,258	0,288	0,227	0,133	0,120	0,109	0,049
159Tb (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	0,015	0,013	0,055	0,023	0,040	0,002	0,031	0,037	0,024	0,017	0,014	0,010	0,007
163Dy (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	0,094	0,114	0,319	0,110	0,212	0,013	0,166	0,180	0,156	0,098	0,102	0,049	0,033
165Ho (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	0,017	0,025	0,054	0,019	0,036	0,002	0,030	0,034	0,024	0,016	0,017	0,016	0,006
166Er (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	0,062	0,068	0,127	0,065	0,099	0,004	0,083	0,097	0,078	0,042	0,049	0,031	0,026
169Tm (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	0,013	0,008	0,020	0,005	0,014	0,001	0,010	0,011	0,009	0,007	0,006	0,006	0,002
172Yb (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	0,045	0,065	0,124	0,048	0,108	0,008	0,075	0,065	0,055	0,034	0,048	0,033	0,014
175Lu (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	0,009	0,008	0,013	0,010	0,011	0,001	0,007	0,015	0,007	0,007	0,005	0,006	0,003
178Hf (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	0,001	0,001	0,011	0,004	0,005	0,003	0,000	0,003	0,002	0,006	0,006	0,001	0,000
181Ta (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	0,016	0,009	0,016	0,011	0,017	0,011	0,010	0,008	0,008	0,011	0,009	0,011	0,012
182W (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	4,515	4,568	5,456	3,645	0,059	0,295	0,953	0,035	0,201	0,146	0,136	0,106	0,090
185Re (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	1,174	1,431	1,488	0,933	0,006	0,017	0,257	0,005	0,286	0,447	0,303	0,240	0,281
193Ir (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	0,198	0,144	0,119	0,082	0,094	0,084	0,070	0,043	0,042	0,034	0,036	0,033	0,027
195Pt (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	0,005	0,004	0,009	0,003	0,005	0,002	0,004	0,002	0,001	0,001	0,002	0,004	0,005
197Au (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]													
202Hg   202Hg (M-TQ-O2)	Conc. [ ppb ]	0,049	0,099	0,265	0,044	0,048	0,010	0,029	0,025	0,021	0,025	0,018	0,012	0,012
205Tl (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	1,519	1,488	3,061	1,150	0,472	0,048	0,373	0,379	0,313	0,322	0,284	0,274	0,218
208Pb (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	4,683	8,470	31,439	3,960	2,054	1,001	2,386	1,905	5,051	3,403	4,379	4,240	1,495
209Bi (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	0,133	0,217	0,970	0,113	0,058	-0,002	0,070	0,061	0,009	0,005	0,015	0,009	0,000
232Th (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	0,015	0,025	0,023	0,006	0,028	0,007	0,015	0,032	0,010	0,020	0,017	0,013	0,003
238U (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	0,156	0,154	0,147	0,138	0,035	0,427	0,084	0,033	0,391	0,367	0,304	0,280	0,257

Bijlage A: meetdata afval- en oppervlaktewater

iCAP TQ ICP-MS		OW14	OW15	OW16	OW17	OW18	OW19	OW20	OW21	OW22	OW23	OW24	OW25
7Li (M-SQ-N/A)	Conc. [ ppb ]	28,852	6,254	6,580	6,836	706,873	3,053	6,447	1,497	4,917	5,405	4,778	6,282
9Be (M-SQ-N/A)	Conc. [ ppb ]	0,000	-0,022	-0,008	-0,018	-0,008	0,071	0,030	-0,047	-0,033	-0,003	0,046	-0,037
11B (M-SQ-N/A)	Conc. [ ppb ]	108,075	29,404	28,715	30,896	60,630	14,932	29,951	38,250	32,309	52,213	39,835	36,972
23Na (M-SQ-KED)	Conc. [ ppm ]	34,335	26,717	25,988	26,439	161,829	11,226	26,100	24,880	27,164	24,285	27,073	25,968
24Mg (M-SQ-KED)	Conc. [ ppm ]	5,235	7,474	7,189	7,465	3,354	3,363	7,290	4,876	6,587	5,031	6,693	7,650
27Al (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	51,182	265,092	377,479	442,385	213,470	130,859	520,936	48,794	47,621	16,395	148,684	143,518
28Si   28Si.18O (M-TQ-O2)	Conc. [ ppm ]	3,890	1,793	2,003	2,064	5,807	2,671	2,247	0,867	0,787	0,237	1,881	1,721
31P   31P.16O (M-TQ-O2)	Conc. [ ppm ]	0,215	0,149	0,153	0,154	0,609	0,051	0,161	0,017	0,071	0,024	0,114	0,147
32S   32S.16O (M-TQ-O2)	Conc. [ ppm ]	25,630	11,916	11,839	11,679	102,445	20,383	11,878	9,254	11,510	9,651	13,698	11,002
39K (M-SQ-KED)	Conc. [ ppm ]	11,391	9,098	9,174	8,711	49,404	8,810	8,642	4,289	6,452	5,156	7,642	7,296
44Ca (M-SQ-KED)	Conc. [ ppm ]	57,556	65,213	63,548	65,790	25,630	29,965	65,454	35,876	56,302	40,452	54,756	63,533
45Sc (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	-0,735	-0,686	-0,793	-0,556	-0,654	-0,549	-0,573	-0,805	-0,749	-0,805	-0,790	-0,836
49Ti (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	4,914	7,229	9,768	10,624	4,446	5,730	11,193	2,772	4,624	2,932	6,630	4,519
51V (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	0,496	1,941	2,344	1,849	1,549	4,959	2,297	0,624	0,977	0,989	4,123	1,550
52Cr (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	0,630	1,703	2,453	2,195	3,192	5,781	2,327	0,727	0,243	0,648	2,974	1,009
55Mn (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	108,431	54,288	45,140	51,489	76,558	93,470	53,650	73,249	22,499	11,894	42,749	27,349
56Fe (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	995,655	384,251	514,250	581,185	347,746	2553,114	652,719	212,934	76,509	55,337	753,739	210,010
59Co (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	2,162	0,535	0,560	0,627	6,482	3,735	0,719	0,147	0,466	0,147	1,480	0,317
60Ni (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	7,023	2,995	3,049	3,439	16,368	11,431	3,114	1,407	2,529	1,569	3,916	2,383
63Cu (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	1,780	3,116	3,743	3,827	3,365	4,272	4,198	0,553	2,367	1,665	3,101	4,734
66Zn (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	511,222	21,045	29,035	28,823	64,856	40,935	33,957	2,573	8,783	3,131	86,108	34,968
71Ga (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	0,065	0,097	0,353	0,068	0,151	0,079	0,291	-0,030	-0,077	-0,014	0,051	0,004
74Ge (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]												
75As (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	3,812	1,294	1,366	1,369	4,449	7,422	1,400	1,040	1,653	1,681	4,003	2,296
80Se   80Se.16O (M-TQ-O2)	Conc. [ ppb ]	1,078	1,005	1,147	0,938	1,280	2,104	1,078	0,688	0,746	0,429	1,038	1,431
85Rb (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	18,669	5,823	6,350	5,726	24,720	12,066	5,623	5,956	5,262	6,979	7,321	5,337
88Sr (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	198,272	195,610	188,618	193,474	77,865	113,555	193,516	119,116	176,810	142,252	177,639	195,068
89Y (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	0,234	0,434	0,435	0,490	0,525	1,782	0,651	0,063	0,053	0,045	0,439	0,148
90Zr (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	0,028	0,141	0,208	0,240	0,113	0,354	0,292	0,062	0,012	-0,020	0,081	0,033
93Nb (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	0,009	0,017	0,031	0,026	0,006	0,025	0,052	0,009	0,005	0,003	0,011	0,024
98Mo (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	1,587	2,125	2,235	2,064	2,506	1,667	1,938	1,070	1,965	2,273	1,792	2,077
101Ru (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	0,000	0,004	0,004	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,004	0,000	0,000
105Pd (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	0,003	0,000	0,013	0,016	0,003	0,006	-0,006	0,003	0,010	0,006	-0,003	-0,006
107Ag (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	-0,002	0,011	0,006	0,031	0,003	0,017	0,032	-0,004	-0,005	-0,008	0,004	0,012
111Cd   111Cd (M-TQ-O2)	Conc. [ ppb ]	0,689	0,157	0,224	0,273	0,155	0,204	0,332	0,019	0,048	0,013	0,533	0,264
115In (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	0,014	0,011	0,012	0,009	0,005	0,005	0,019	0,004	0,007	0,000	0,018	0,007
118Sn (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	0,063	0,325	0,265	0,362	0,251	0,053	0,333	0,151	-0,022	-0,023	0,055	0,249
121Sb (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	0,882	-0,171	-0,192	-0,740	-0,286	-0,409	-0,876	-0,850	-0,888	-0,674	-0,764	-0,895
125Te (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	-0,079	-0,079	-0,079	-0,079	-0,079	-0,079	-0,079	-0,079	-0,079	-0,079	0,000	-0,079
133Cs (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	5,733	0,240	0,267	0,295	0,146	0,036	0,244	0,032	0,094	0,076	0,157	0,153

iCAP TQ ICP-MS		OW14	OW15	OW16	OW17	OW18	OW19	OW20	OW21	OW22	OW23	OW24	OW25
138Ba (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	28,298	26,466	25,326	27,318	16,326	78,532	27,938	26,104	28,708	31,253	45,219	25,355
139La (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	0,179	0,458	0,538	0,680	0,404	0,749	0,851	0,044	0,069	0,023	0,394	0,204
140Ce (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	0,392	0,859	1,215	1,224	0,879	1,999	1,574	0,119	0,112	0,034	0,835	0,386
141Pr (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	0,041	0,112	0,157	0,148	0,113	0,291	0,196	0,018	0,015	0,006	0,108	0,040
146Nd (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	0,171	0,403	0,564	0,665	0,468	1,265	0,798	0,046	0,050	0,026	0,449	0,218
149Sm (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	0,059	0,044	0,074	0,098	0,124	0,306	0,149	0,011	0,019	0,015	0,119	0,034
153Eu (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	0,006	0,022	0,027	0,026	0,028	0,070	0,041	0,010	0,006	0,004	0,032	0,014
157Gd (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	0,094	0,094	0,122	0,156	0,281	0,325	0,166	0,022	0,024	0,016	0,121	0,064
159Tb (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	0,005	0,012	0,017	0,018	0,016	0,042	0,018	0,003	0,003	0,001	0,011	0,006
163Dy (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	0,035	0,056	0,074	0,099	0,109	0,240	0,098	0,011	0,017	0,013	0,072	0,030
165Ho (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	0,005	0,012	0,016	0,020	0,016	0,064	0,023	0,003	0,002	0,001	0,014	0,005
166Er (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	0,024	0,019	0,038	0,036	0,059	0,188	0,054	0,005	0,003	0,004	0,048	0,017
169Tm (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	0,002	0,006	0,005	0,012	0,009	0,024	0,005	0,002	0,001	0,001	0,005	0,004
172Yb (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	0,021	0,039	0,026	0,047	0,064	0,132	0,047	0,013	0,012	0,009	0,050	0,022
175Lu (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	0,006	0,002	0,005	0,004	0,007	0,017	0,006	0,001	-0,001	0,002	0,008	0,003
178Hf (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	0,004	0,007	0,004	0,006	0,002	0,010	0,011	0,001	0,001	0,000	0,006	0,000
181Ta (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	0,008	0,009	0,010	0,019	0,011	0,005	0,017	0,012	0,005	0,004	0,009	0,009
182W (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	0,088	0,334	0,279	0,326	0,455	0,092	0,314	0,084	0,244	0,133	0,167	0,290
185Re (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	0,195	0,023	0,018	0,022	0,005	0,002	0,024	0,013	0,020	0,010	0,029	0,017
193Ir (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	0,019	0,008	0,016	0,020	0,003	-0,003	0,018	0,015	-0,001	-0,005	0,004	0,012
195Pt (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	0,004	0,001	0,001	0,000	0,004	0,001	0,003	0,002	0,001	0,005	0,003	0,001
197Au (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]												
202Hg   202Hg (M-TQ-O2)	Conc. [ ppb ]	0,016	0,010	0,029	0,025	0,025	0,039	0,032	0,008	0,012	0,007	0,015	0,020
205Tl (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	0,257	0,037	0,056	0,055	0,055	0,047	0,055	0,023	0,045	0,014	0,067	0,087
208Pb (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	1,707	4,461	5,411	6,271	1,700	1,885	7,168	0,242	0,637	0,198	5,013	5,268
209Bi (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	0,012	0,024	0,045	0,052	0,075	-0,001	0,065	-0,003	-0,001	-0,006	0,005	0,019
232Th (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	0,010	0,042	0,025	0,070	0,019	0,033	0,113	0,018	0,002	0,000	0,014	0,011
238U (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	0,163	0,432	0,409	0,454	0,047	0,062	0,454	0,186	0,461	0,354	0,580	0,441



ICP-QQQ-MS		AW1	AW2	AW3	AW4	AW5	AW6	AW7	AW8	AW9	AW10	AW11	AW12	AW13
135 Ba [ He ]	Conc. [ ppb ]	80,458	39,238	5,241	21,164	16,685	39,641	439,924	331,883	2,909	5,678	5,778	23,404	82,125
139 La [ He ]	Conc. [ ppb ]	0,042	0,034	0,017	0,024	0,061	0,009	0,061	0,020	0,010	0,004	0,010	0,016	0,026
140 Ce [ He ]	Conc. [ ppb ]	0,052	0,067	0,015	0,044	0,139	0,023	0,069	0,041	0,011	0,013	0,015	0,027	0,035
141 Pr [ He ]	Conc. [ ppb ]	0,007	0,009	0,001	0,008	0,021	0,005	0,007	0,001	0,002	0,002	0,002	0,004	0,004
146 Nd [ He ]	Conc. [ ppb ]	0,022	0,068	0,001	0,033	0,106	0,040	0,033	0,005	0,009	0,001	0,009	0,014	0,025
147 Sm [ He ]	Conc. [ ppb ]	0,005	0,029	0,001	0,010	0,027	0,013	0,011	0,002	0,006	0,000	0,000	0,006	0,006
151 Eu [ He ]	Conc. [ ppb ]	0,004	0,006	0,000	0,003	0,005	0,005	0,005	0,003	0,000	0,000	0,000	0,000	0,004
155 Gd [ He ]	Conc. [ ppb ]	0,040	0,059	0,002	0,047	0,048	0,037	0,110	0,101	0,024	0,006	0,006	0,114	1,207
159 Tb [ He ]	Conc. [ ppb ]	0,003	0,016	0,000	0,002	0,002	0,004	0,001	0,000	0,000	0,000	0,000	0,001	0,002
161 Dy [ He ]	Conc. [ ppb ]	0,036	0,138	0,001	0,008	0,022	0,024	0,006	0,004	0,005	0,000	0,004	0,002	0,004
165 Ho [ He ]	Conc. [ ppb ]	0,010	0,042	0,001	0,003	0,005	0,005	0,001	0,000	0,003	0,000	0,000	0,002	0,002
166 Er [ He ]	Conc. [ ppb ]	0,035	0,158	0,001	0,004	0,016	0,014	0,005	0,001	0,012	0,001	0,001	0,008	0,011
169 Tm [ He ]	Conc. [ ppb ]	0,005	0,023	0,000	0,001	0,002	0,001	0,000	0,001	0,004	0,000	0,000	0,001	0,003
172 Yb [ He ]	Conc. [ ppb ]	0,030	0,183	0,001	0,007	0,011	0,013	0,003	0,001	0,053	0,000	0,002	0,007	0,033
175 Lu [ He ]	Conc. [ ppb ]	0,006	0,027	0,000	0,001	0,001	0,002	0,001	0,000	0,010	0,000	0,000	0,001	0,006
178 Hf [ He ]	Conc. [ ppb ]	0,059	0,061	0,000	0,005	<0.000	0,000	0,004	0,001	0,001	<0.000	<0.000	0,000	0,004
181 Ta [ He ]	Conc. [ ppb ]	0,003	0,005	0,004	0,003	0,002	0,003	0,006	0,005	0,002	0,002	0,003	0,003	0,004
182 W [ He ]	Conc. [ ppb ]	0,984	0,243	25,607	0,540	0,397	17,780	26,182	6,412	4,313	0,324	0,306	0,074	1,109
185 Re [ He ]	Conc. [ ppb ]	0,167	0,241	0,380	0,039	0,071	111,269	2,527	1,600	0,035	0,012	0,022	0,015	0,040
191 Ir [ No Gas ]	Conc. [ ppb ]	0,054	0,065	0,067	0,057	0,057	0,492	0,028	0,034	0,036	0,044	0,028	<0.000	<0.000
195 Pt [ He ]	Conc. [ ppb ]	<0.000	<0.000	0,014	<0.000	<0.000	1,162	0,373	0,029	0,003	0,007	0,016	0,020	0,003
197 Au [ No Gas ]	Conc. [ ppb ]	0,093	0,034	0,008	0,031	<0.000	0,499	1,065	1,723	0,137	0,076	0,046	0,047	0,041
201 -> 201 Hg [ O2+H2 ]	Conc. [ ppb ]	0,006	0,003	<0.000	<0.000	<0.000	0,044	1,473	0,183	<0.000	0,005	0,007	0,005	0,006
203 Tl [ He ]	Conc. [ ppb ]	0,573	0,010	0,195	0,011	0,005	2,242	8,510	5,037	<0.000	<0.000	<0.000	<0.000	<0.000
208 Pb [ He ]	Conc. [ ppb ]	0,189	0,525	<0.000	8,359	0,048	1,400	14,863	2,120	2,877	0,048	0,023	0,045	0,351
209 Bi [ He ]	Conc. [ ppb ]	0,016	0,029	0,014	0,047	0,011	0,037	3,090	0,111	0,018	0,014	0,009	0,012	0,008
232 Th [ No Gas ]	Conc. [ ppb ]	0,002	0,005	0,001	0,002	0,004	0,001	0,006	0,002	0,001	0,004	0,004	0,002	0,002
238 U [ He ]	Conc. [ ppb ]	12,899	0,879	5,140	0,084	0,384	0,008	0,026	0,175	0,056	0,187	0,190	0,704	8,217

## Bijlage A: meetdata afval- en oppervlaktewater

ICP-QQQ-MS		AW14	AW15	AW16	AW17	AW18	AW19	AW20	AW21	AW22	AW23	AW24	AW25
7 Li [ No Gas ]	Conc. [ ppb ]	15,345	19,315	17,869	19,922	19,812	17,808	9,745	25,811	82,001	28,998	92,081	11,320
9 Be [ No Gas ]	Conc. [ ppb ]	0,055	0,109	0,090	0,035	0,007	0,022	0,064	0,003	0,008	0,208	0,003	0,001
10 B [ No Gas ]	Conc. [ ppb ]	121,088	129,714	165,788	192,178	211,453	348,021	104,260	431,816	1012,979	313,630	1029,156	200,150
23 Na [ He ]	Conc. [ ppm ]	124,208	158,166	155,453	181,262	192,594	260,304	86,609	417,794	7016,252	83,294	3402,209	111,358
24 Mg [ He ]	Conc. [ ppm ]	11,162	16,240	14,958	16,946	18,370	12,938	7,111	51,429	54,758	52,082	477,686	22,776
27 Al [ No Gas ]	Conc. [ ppb ]	1482,765	2296,558	1522,177	624,962	468,623	1013,088	1130,803	64,191	109,538	1831,449	76,498	28,114
28 -> 28 Si [ H2 ]	Conc. [ ppm ]	12,218	15,284	10,590	9,995	14,700	11,252	11,460	8,355	13,813	39,091	4,355	9,020
31 -> 47 P [ O2+H2 ]	Conc. [ ppm ]	12,738	11,529	9,563	11,911	7,020	13,775	4,497	4,351	4,046	45,973	1,617	0,011
32 -> 48 S [ O2+H2 ]	Conc. [ ppm ]	22,231	46,367	37,477	50,521	26,438	26,217	27,627	84,151	1443,527	44,050	373,626	12,719
39 -> 39 K [ O2+H2 ]	Conc. [ ppm ]	44,345	51,602	31,002	43,649	30,315	44,182	26,010	872,454	2123,805	1262,158	155,159	11,790
40 -> 40 Ca [ O2+H2 ]	Conc. [ ppm ]	124,841	94,544	95,899	76,873	93,077	62,297	63,460	29,778	2349,838	117,592	380,292	93,239
45 -> 61 Sc [ O2+H2 ]	Conc. [ ppb ]	0,314	0,433	0,277	0,045	0,027	0,078	0,194	<0.000	0,085	0,819	0,018	<0.000
47 -> 63 Ti [ O2+H2 ]	Conc. [ ppb ]	42,402	51,365	36,656	9,908	5,920	14,794	23,627	1,626	3,644	131,078	1,959	0,171
51 -> 67 V [ O2+H2 ]	Conc. [ ppb ]	4,722	7,166	5,335	1,959	1,717	3,745	5,008	7,393	1,300	33,348	9,598	0,224
52 Cr [ He ]	Conc. [ ppb ]	6,830	12,961	8,534	3,173	2,585	5,105	5,378	0,894	6,075	11,260	1,008	0,547
55 -> 55 Mn [ O2+H2 ]	Conc. [ ppb ]	89,660	174,042	121,975	55,587	89,637	45,498	199,144	23,157	6999,700	581,786	56,408	403,454
56 -> 56 Fe [ H2 ]	Conc. [ ppb ]	2443,408	4384,847	3762,247	739,477	1458,638	1199,672	1854,799	162,384	72284,517	3877,159	164,558	56,673
59 Co [ He ]	Conc. [ ppb ]	1,715	1,806	1,762	0,882	0,493	1,070	1,080	2,475	140,906	13,301	1,024	0,249
60 -> 60 Ni [ O2+H2 ]	Conc. [ ppb ]	8,830	9,868	8,911	6,334	4,607	6,426	5,830	9,914	377,237	25,319	6,990	3,685
65 Cu [ He ]	Conc. [ ppb ]	89,884	84,799	91,385	53,464	53,948	94,648	38,134	17,726	435,610	72,136	5,767	1,473
66 -> 66 Zn [ O2+H2 ]	Conc. [ ppb ]	262,562	379,683	367,438	206,372	100,951	292,372	229,220	14,372	1095,821	218,964	15,777	30,747
71 -> 71 Ga [ O2+H2 ]	Conc. [ ppb ]	0,376	0,587	0,415	0,159	0,099	0,254	0,279	0,094	2,121	0,572	0,090	0,017
72 Ge [ He ]	Conc. [ ppb ]	0,157	0,309	0,275	0,072	0,022	0,064	0,157	0,172	0,356	0,429	0,115	0,038
75 -> 91 As [ O2+H2 ]	Conc. [ ppb ]	2,436	2,761	2,703	1,571	4,897	3,602	3,395	1,253	0,705	13,839	7,872	1,361
78 -> 94 Se [ O2+H2 ]	Conc. [ ppb ]	1,858	1,020	1,121	0,537	0,553	1,007	0,874	0,246	4,812	1,297	1,804	0,049
85 Rb [ He ]	Conc. [ ppb ]	28,148	23,472	17,935	27,021	15,721	27,977	16,709	136,003	192,291	275,968	44,636	4,127
88 Sr [ He ]	Conc. [ ppb ]	445,929	396,409	383,341	396,158	471,780	256,761	221,267	76,527	1610,834	387,771	2901,204	456,475
89 -> 105 Y [ O2+H2 ]	Conc. [ ppb ]	1,092	1,684	1,587	0,392	0,172	0,371	0,886	0,041	0,812	5,140	0,203	0,035
90 Zr [ He ]	Conc. [ ppb ]	1,455	1,401	1,361	1,073	0,622	1,469	1,377	0,045	0,161	3,163	0,228	0,011
93 -> 125 Nb [ O2+H2 ]	Conc. [ ppb ]	0,154	0,190	0,187	0,036	0,031	0,064	0,109	0,014	0,012	0,512	0,015	0,002
95 Mo [ He ]	Conc. [ ppb ]	2,181	2,165	2,459	1,516	2,001	3,632	3,295	10,540	27,971	11,801	30,186	0,755
99 Ru [ He ]	Conc. [ ppb ]	<0.000	<0.000	<0.000	<0.000	<0.000	<0.000	<0.000	<0.000	<0.000	<0.000	<0.000	<0.000
105 Pd [ He ]	Conc. [ ppb ]	0,018	0,019	0,018	0,008	0,021	0,017	0,010	0,003	0,039	0,011	0,040	0,011
107 Ag [ He ]	Conc. [ ppb ]	0,197	0,395	0,273	0,143	0,369	0,344	1,158	0,032	0,034	0,051	0,043	0,025
111 -> 111 Cd [ O2+H2 ]	Conc. [ ppb ]	0,312	0,351	0,362	0,174	0,110	0,315	0,239	0,009	1,505	0,533	0,068	0,103
115 -> 115 In [ O2+H2 ]	Conc. [ ppb ]	<0.000	0,035	0,004	<0.000	<0.000	<0.000	<0.000	<0.000	<0.000	0,003	<0.000	0,000
118 -> 118 Sn [ O2+H2 ]	Conc. [ ppb ]	6,121	8,117	6,673	4,558	3,009	7,052	5,465	0,131	0,118	1,142	<0.000	<0.000
121 -> 121 Sb [ O2+H2 ]	Conc. [ ppb ]	1,599	2,231	2,328	1,362	0,649	2,186	1,739	0,577	1,465	1,596	3,993	0,436
125 -> 125 Te [ O2+H2 ]	Conc. [ ppb ]	0,204	0,266	0,215	0,168	0,154	0,192	0,203	0,144	0,296	0,215	0,484	0,213
133 Cs [ He ]	Conc. [ ppb ]	0,374	0,364	0,287	0,200	0,113	0,221	0,164	0,133	0,958	0,476	0,802	0,092
135 Ba [ He ]	Conc. [ ppb ]	65,603	53,956	62,426	29,723	18,965	31,504	41,285	4,079	2,771	65,705	92,767	16,599

ICP-QQQ-MS		AW14	AW15	AW16	AW17	AW18	AW19	AW20	AW21	AW22	AW23	AW24	AW25
139 La [ He ]	Conc. [ ppb ]	1,763	9,056	2,009	0,651	0,716	0,813	1,489	0,048	0,037	3,276	0,041	0,021
140 Ce [ He ]	Conc. [ ppb ]	3,105	4,782	3,463	1,141	0,464	1,385	2,570	0,107	0,122	7,288	0,109	0,037
141 Pr [ He ]	Conc. [ ppb ]	0,370	0,595	0,414	0,132	0,055	0,142	0,301	0,016	0,007	0,906	0,016	0,002
146 Nd [ He ]	Conc. [ ppb ]	1,514	2,411	1,735	0,500	0,216	0,566	1,249	0,074	0,053	3,829	0,070	0,005
147 Sm [ He ]	Conc. [ ppb ]	0,287	0,475	0,361	0,098	0,038	0,119	0,214	0,022	0,014	0,933	0,014	0,001
151 Eu [ He ]	Conc. [ ppb ]	0,059	0,095	0,070	0,023	0,011	0,023	0,054	0,001	0,007	0,214	0,001	0,000
155 Gd [ He ]	Conc. [ ppb ]	0,446	0,734	0,546	0,833	0,114	0,342	0,428	0,080	0,042	0,892	0,294	0,007
159 Tb [ He ]	Conc. [ ppb ]	0,037	0,054	0,045	0,014	0,004	0,013	0,027	0,001	0,009	0,146	0,002	0,000
161 Dy [ He ]	Conc. [ ppb ]	0,202	0,303	0,261	0,076	0,026	0,076	0,157	0,007	0,087	0,892	0,013	0,002
165 Ho [ He ]	Conc. [ ppb ]	0,039	0,061	0,049	0,013	0,006	0,014	0,031	0,002	0,026	0,175	0,003	0,001
166 Er [ He ]	Conc. [ ppb ]	0,109	0,165	0,128	0,029	0,014	0,037	0,082	0,004	0,105	0,517	0,008	0,000
169 Tm [ He ]	Conc. [ ppb ]	0,014	0,022	0,017	0,006	0,002	0,005	0,013	0,001	0,018	0,073	0,001	0,000
172 Yb [ He ]	Conc. [ ppb ]	0,088	0,125	0,119	0,040	0,015	0,027	0,081	0,003	0,142	0,439	0,014	0,000
175 Lu [ He ]	Conc. [ ppb ]	0,011	0,018	0,015	0,004	0,002	0,004	0,009	0,002	0,026	0,071	0,001	0,000
178 Hf [ He ]	Conc. [ ppb ]	0,033	0,034	0,030	0,024	0,017	0,033	0,029	0,000	0,001	0,090	0,003	0,001
181 Ta [ He ]	Conc. [ ppb ]	0,008	0,007	0,007	0,003	0,004	0,005	0,006	0,003	0,006	0,014	0,003	0,003
182 W [ He ]	Conc. [ ppb ]	0,299	0,463	0,600	0,258	0,170	0,492	0,290	0,022	0,793	0,463	0,776	0,041
185 Re [ He ]	Conc. [ ppb ]	0,009	0,030	0,011	0,025	0,016	0,018	0,007	0,020	0,059	0,021	0,043	0,003
191 Ir [ No Gas ]	Conc. [ ppb ]	0,011	0,004	0,044	0,093	0,089	0,099	0,033	0,005	0,202	<0.000	<0.000	2,716
195 Pt [ He ]	Conc. [ ppb ]	0,003	0,003	0,010	0,006	<0.000	0,044	0,004	<0.000	0,032	0,037	0,006	0,010
197 Au [ No Gas ]	Conc. [ ppb ]	0,075	0,072	0,131	0,056	0,058	0,116	0,073	<0.000	0,185	0,026	0,016	0,010
201 -> 201 Hg [ O2+H2 ]	Conc. [ ppb ]	0,027	0,164	0,100	0,023	0,029	0,054	0,352	<0.000	0,003	0,052	0,010	<0.000
203 Tl [ He ]	Conc. [ ppb ]	0,011	0,023	0,025	<0.000	<0.000	0,028	0,011	<0.000	0,012	0,024	0,583	<0.000
208 Pb [ He ]	Conc. [ ppb ]	27,503	29,920	28,229	7,720	12,204	13,221	19,435	1,420	1,689	14,184	0,903	1,253
209 Bi [ He ]	Conc. [ ppb ]	3,869	3,276	3,706	4,487	2,948	5,626	2,464	0,011	0,146	0,157	0,021	0,011
232 Th [ No Gas ]	Conc. [ ppb ]	0,270	0,452	0,222	0,053	0,031	0,127	0,174	0,013	0,005	0,977	0,018	0,001
238 U [ He ]	Conc. [ ppb ]	0,849	0,476	1,028	0,366	0,290	0,275	0,350	0,111	7,189	1,347	3,076	0,055

Bijlage A: meetdata afval- en oppervlaktewater

iCAP TQ ICP-MS		AW1	AW2	AW3	AW4	AW5	AW6	AW7	AW8	AW9	AW10	AW11	AW12	AW13
7Li (M-SQ-N/A)	Conc. [ ppb ]	6815,479	27081,272	1066,649	227,975	12,362	150,097	1379,114	575,698	69,608	3,637	3,923	13,970	20,635
9Be (M-SQ-N/A)	Conc. [ ppb ]	-0,040	-0,018	-0,031	-0,017	-0,037	-0,007	-0,014	-0,028	-0,036	-0,023	-0,037	-0,032	-0,021
11B (M-SQ-N/A)	Conc. [ ppb ]	2565,522	5382,998	130,935	395,095	46,792	6562,948	18081,792	9427,751	3004,836	39,249	37,856	96,552	329,473
23Na (M-SQ-KED)	Conc. [ ppm ]	1949,992	2854,358	2062,542	355,172	48,195	4186,857	4435,624	3360,015	1242,742	92,957	117,166	116,147	172,451
24Mg (M-SQ-KED)	Conc. [ ppm ]	9,043	11,183	28,603	6,222	6,936	4,505	34,090	51,564	8,595	2,319	1,687	6,724	44,888
27Al (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	37,811	64,688	9,876	48,119	425,836	64,798	65,157	49,385	894,285	89,874	59,150	11,632	26,045
28Si   28Si.18O (M-TQ-O2)	Conc. [ ppm ]	10,773	10,060	8,140	10,727	2,787	1,566	4,189	5,021	1,474	4,070	4,947	4,289	8,074
31P   31P.16O (M-TQ-O2)	Conc. [ ppm ]	0,847	0,422	0,295	1,441	0,076	0,304	0,101	0,051	0,191	13,177	7,180	2,362	0,651
32S   32S.16O (M-TQ-O2)	Conc. [ ppm ]	575,107	743,520	662,132	66,115	13,555	1004,051	548,886	319,210	58,811	21,834	24,886	13,907	242,594
39K (M-SQ-KED)	Conc. [ ppm ]	292,232	332,654	8,567	67,778	3,957	291,257	1699,647	611,472	82,486	13,201	13,439	23,542	42,034
44Ca (M-SQ-KED)	Conc. [ ppm ]	590,142	535,057	21,628	37,731	60,607	135,559	2151,113	2772,214	35,466	288,854	279,587	75,399	389,582
45Sc (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	-0,530	-0,257	-0,625	-0,707	-0,824	-0,709	-0,068	0,074	-0,697	-0,759	-0,697	-0,806	-0,746
49Ti (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	14,969	24,411	8,965	6,520	4,275	13,004	17,064	11,481	4,488	1,967	4,024	1,582	3,281
51V (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	1,026	1,118	0,412	3,424	1,498	0,230	0,562	0,717	3,254	1,474	1,040	1,323	31,299
52Cr (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	1,799	2,105	4,097	8,520	1,246	2,035	2,449	1,879	1,785	2,641	1,219	1,201	1,231
55Mn (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	403,973	286,859	2,450	16,186	21,358	6,074	87,197	210,631	451,929	17,803	16,417	12,985	275,938
56Fe (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	852,638	4074,023	223,055	1568,570	163,872	270,022	8066,593	6969,236	246,188	820,538	514,936	20,617	91,257
59Co (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	29,805	46,198	34,477	0,603	0,257	0,774	1,926	7,361	4,118	0,256	0,262	0,875	2,332
60Ni (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	194,803	579,883	25,636	19,664	1,888	14,779	7,056	25,764	185,854	2,766	2,077	6,879	18,480
63Cu (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	2,792	2,277	3,669	28,604	2,414	1,383	4,566	1,230	79,202	1,373	0,863	7,383	22,542
66Zn (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	32,991	144,987	2,824	147,832	15,587	5,603	23,313	45,001	1036,217	19,499	13,383	14,180	19,954
71Ga (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	0,701	0,701	0,007	-0,029	0,020	0,646	0,128	-0,026	0,786	-0,062	-0,046	-0,030	0,089
74Ge (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]													
75As (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	55,558	4,261	5,305	1,550	0,531	46,204	8,864	2,716	2,622	4,528	4,940	7,090	5,539
80Se   80Se.16O (M-TQ-O2)	Conc. [ ppb ]	1,380	1,965	1,498	0,416	0,468	116,373	11,517	11,550	0,471	4,064	4,450	0,639	1,500
85Rb (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	318,467	260,219	9,069	10,335	5,542	1833,187	1079,769	416,703	30,610	14,777	12,277	6,325	19,459
88Sr (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	1424,998	1180,335	118,039	136,948	179,951	566,577	6027,227	5246,018	62,312	205,571	189,410	475,355	2062,559
89Y (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	0,495	1,306	0,013	0,067	0,167	0,131	0,110	0,033	0,032	0,009	0,015	0,033	0,105
90Zr (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	5,278	4,379	-0,018	0,320	-0,002	0,038	0,154	0,125	0,074	-0,003	-0,026	0,004	0,300
93Nb (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	0,545	0,402	0,000	0,019	0,000	0,012	0,016	0,007	0,019	0,014	0,005	0,000	0,131
98Mo (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	238,434	192,810	2,626	132,633	155,990	1,305	562,839	324,055	169,105	1,169	1,121	2,736	20,967
101Ru (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	0,018	0,014	0,895	0,004	0,004	0,221	0,010	0,004	0,000	0,008	0,000	0,000	0,000
105Pd (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	0,084	0,082	-0,002	0,028	0,003	0,077	1,040	0,480	0,014	-0,003	0,016	0,018	0,097
107Ag (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	0,056	0,025	4,713	6,163	0,021	0,059	0,050	0,029	0,033	0,003	-0,001	0,022	0,054
111Cd   111Cd (M-TQ-O2)	Conc. [ ppb ]	0,044	0,078	0,013	0,295	0,209	0,427	0,993	5,870	0,763	0,053	0,055	0,108	0,080
115In (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	0,000	0,002	0,000	0,002	0,002	0,000	0,008	0,006	0,015	0,005	0,000	0,005	0,000
118Sn (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	-0,063	0,007	-0,123	0,020	-0,099	-0,028	0,408	0,054	1,435	-0,107	-0,099	-0,054	-0,091
121Sb (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	3,781	1,507	12,617	-0,699	-1,031	0,981	106,650	88,914	2,840	-1,675	-1,658	-1,395	12,616
125Te (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	-0,079	-0,079	-0,079	-0,079	-0,079	0,179	-0,079	-0,079	0,087	-0,079	-0,079	-0,079	-0,079
133Cs (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	6,595	9,540	0,170	0,157	0,317	778,362	3126,626	913,895	1,400	0,126	0,119	0,000	0,075
138Ba (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	84,109	43,376	5,196	23,901	18,224	40,208	463,361	355,864	3,293	6,475	6,166	24,989	91,588



iCAP TQ ICP-MS		AW1	AW2	AW3	AW4	AW5	AW6	AW7	AW8	AW9	AW10	AW11	AW12	AW13
139La (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	0,051	0,033	0,013	0,071	0,071	0,007	0,083	0,013	0,021	0,005	0,009	0,015	0,027
140Ce (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	0,071	0,074	0,031	0,075	0,148	0,034	0,070	0,034	0,035	0,019	0,028	0,042	0,038
141Pr (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	0,009	0,013	0,007	0,009	0,030	0,007	0,003	0,007	0,004	0,005	0,005	0,007	0,010
146Nd (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	0,045	0,067	0,004	0,024	0,093	0,044	0,018	-0,002	-0,003	-0,003	0,016	0,003	0,011
149Sm (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	0,020	0,008	0,000	0,015	0,034	0,032	0,000	0,008	0,015	0,007	0,000	0,011	0,008
153Eu (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	0,003	0,012	0,000	0,003	0,010	0,008	0,030	0,018	0,000	0,000	0,002	0,001	0,005
157Gd (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	0,014	0,077	-0,002	0,044	0,032	0,011	0,010	0,007	0,021	0,000	0,000	0,101	1,249
159Tb (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	0,003	0,010	0,001	0,003	0,004	0,003	0,002	0,000	0,001	0,001	0,000	0,001	0,002
163Dy (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	0,047	0,136	0,003	0,013	0,029	0,018	0,005	0,002	0,009	0,000	0,000	0,007	0,010
165Ho (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	0,010	0,041	0,000	0,001	0,006	0,005	0,001	0,000	0,002	0,000	0,000	0,002	0,002
166Er (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	0,036	0,159	0,000	0,009	0,014	0,007	0,001	0,000	0,019	0,002	0,000	0,005	0,016
169Tm (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	0,005	0,028	0,000	0,000	0,003	0,002	0,000	0,000	0,003	0,000	0,001	0,001	0,003
172Yb (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	0,035	0,224	0,004	0,012	0,019	0,013	0,004	0,000	0,051	0,002	0,005	0,007	0,023
175Lu (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	0,003	0,031	-0,001	0,002	0,001	0,001	0,000	-0,001	0,011	-0,001	-0,001	0,000	0,006
178Hf (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	0,055	0,062	0,000	0,007	0,000	0,004	0,010	0,003	0,002	0,000	0,002	0,003	0,005
181Ta (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	0,008	0,007	0,010	0,015	0,007	0,017	0,045	0,022	0,009	0,010	0,015	0,006	0,006
182W (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	0,971	0,237	25,119	0,560	0,425	16,562	23,702	6,089	4,212	0,344	0,309	0,053	1,170
185Re (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	0,158	0,229	0,361	0,029	0,069	103,999	2,469	1,656	0,035	0,016	0,020	0,015	0,053
193Ir (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	0,000	-0,002	0,018	0,011	0,063	0,459	0,001	-0,010	-0,001	-0,016	-0,008	-0,023	-0,020
195Pt (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	0,001	0,007	0,032	0,006	0,004	1,125	0,390	0,036	0,018	0,000	0,006	0,010	0,009
197Au (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]													
202Hg   202Hg (M-TQ-O2)	Conc. [ ppb ]	0,013	-0,003	0,011	0,004	-0,003	0,037	1,191	0,144	0,005	0,011	0,004	0,009	0,012
205Tl (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	0,638	0,034	0,210	0,048	0,030	2,029	8,167	5,063	0,009	0,006	0,005	0,020	0,025
208Pb (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	0,458	0,792	0,195	9,264	0,343	1,529	14,107	2,350	3,403	0,416	0,306	0,362	0,676
209Bi (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	0,000	0,000	-0,006	0,030	-0,004	0,005	2,776	0,082	0,002	-0,003	-0,003	-0,005	-0,003
232Th (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	0,006	0,005	-0,001	0,002	0,003	0,001	0,007	0,002	-0,001	0,002	0,002	0,000	0,002
238U (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	12,755	0,877	5,134	0,081	0,390	0,005	0,023	0,175	0,058	0,202	0,187	0,720	8,635

Bijlage A: meetdata afval- en oppervlaktewater

iCAP TQ ICP-MS		AW14	AW15	AW16	AW17	AW18	AW19	AW20	AW21	AW22	AW23	AW24	AW25
7Li (M-SQ-N/A)	Conc. [ ppb ]	11,951	15,624	14,624	16,985	16,290	14,643	7,137	22,096	59,821	13,216	74,350	6,731
9Be (M-SQ-N/A)	Conc. [ ppb ]	0,060	0,033	0,028	-0,018	-0,037	0,020	0,017	-0,042	-0,039	0,143	-0,031	-0,038
11B (M-SQ-N/A)	Conc. [ ppb ]	107,859	117,456	151,784	182,827	201,546	329,258	95,451	433,809	782,667	274,705	911,650	169,991
23Na (M-SQ-KED)	Conc. [ ppm ]	109,564	140,534	138,587	155,819	165,485	223,523	73,695	342,944	6315,323	66,067	2836,971	91,848
24Mg (M-SQ-KED)	Conc. [ ppm ]	9,832	14,507	13,144	14,538	15,964	11,236	6,027	42,736	47,074	46,067	350,788	19,609
27Al (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	1409,930	2204,394	1521,568	542,821	446,100	1006,118	1040,834	57,805	130,477	1499,740	78,128	27,227
28Si   28Si.18O (M-TQ-O2)	Conc. [ ppm ]	8,932	10,812	7,851	7,052	11,234	8,179	8,018	6,159	16,295	23,866	3,117	6,162
31P   31P.16O (M-TQ-O2)	Conc. [ ppm ]	10,218	9,353	7,295	9,319	5,485	11,040	3,602	3,675	3,778	34,745	1,388	0,009
32S   32S.16O (M-TQ-O2)	Conc. [ ppm ]	16,305	37,742	26,810	39,602	19,314	19,494	19,397	67,899	1020,115	33,001	263,534	8,847
39K (M-SQ-KED)	Conc. [ ppm ]	41,467	48,500	27,055	39,327	27,534	40,785	22,773	807,361	2185,314	1203,461	139,461	10,764
44Ca (M-SQ-KED)	Conc. [ ppm ]	118,749	94,068	91,239	74,596	91,842	60,530	59,200	27,190	1954,845	117,046	366,303	91,988
45Sc (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	-0,515	0,011	-0,490	-0,679	-0,779	-0,599	-0,717	-0,804	-0,126	0,163	-0,696	-0,756
49Ti (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	45,495	67,191	41,047	12,109	9,624	21,202	25,739	5,194	23,968	161,758	9,508	3,504
51V (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	4,883	7,474	4,984	1,889	1,634	4,046	5,410	7,148	1,947	38,879	11,363	0,281
52Cr (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	7,694	16,400	9,938	4,501	3,350	7,387	5,435	1,276	8,528	13,410	2,578	5,610
55Mn (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	100,224	180,078	130,382	59,718	97,837	49,625	197,998	24,517	7382,422	613,421	61,627	432,813
56Fe (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	2123,891	3908,425	3492,326	695,590	1363,672	1197,311	1596,281	161,060	69883,541	3481,447	170,407	78,554
59Co (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	1,979	2,087	1,931	0,961	0,624	1,342	1,240	2,791	172,903	15,572	1,137	0,310
60Ni (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	10,433	12,225	10,381	6,926	5,391	7,586	6,558	11,287	443,960	30,768	7,841	6,381
63Cu (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	90,069	97,221	96,722	55,533	61,353	122,835	43,568	1,011	520,961	82,185	6,361	1,765
66Zn (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	299,474	439,408	395,263	226,648	114,414	340,831	253,436	5,676	1323,414	259,339	17,935	39,333
71Ga (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	0,546	0,571	0,432	0,109	0,065	0,269	0,325	0,035	2,950	0,917	0,034	-0,048
74Ge (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]												
75As (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	2,583	3,338	2,649	1,694	5,115	4,040	3,411	1,301	0,768	15,204	8,597	1,364
80Se   80Se.16O (M-TQ-O2)	Conc. [ ppb ]	1,851	1,213	1,130	0,699	0,516	1,046	0,720	0,357	5,013	1,637	2,245	0,134
85Rb (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	32,166	27,611	20,328	29,712	17,919	31,298	18,758	145,540	234,944	331,429	53,944	4,582
88Sr (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	501,890	461,576	431,839	436,589	533,396	292,360	245,592	81,766	1833,803	466,872	3393,311	547,972
89Y (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	1,068	2,093	1,608	0,415	0,200	0,447	0,939	0,067	0,905	5,993	0,073	0,000
90Zr (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	1,490	1,683	1,663	1,055	0,680	1,804	1,332	0,056	0,107	3,795	0,207	0,029
93Nb (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	0,180	0,207	0,188	0,040	0,030	0,076	0,131	0,019	0,018	0,566	0,015	0,003
98Mo (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	2,083	2,533	2,279	1,466	2,063	3,907	3,211	10,447	30,419	12,369	30,062	0,741
101Ru (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	0,000	0,004	0,000	0,000	0,000	0,004	0,004	0,000	0,028	0,000	0,008	0,004
105Pd (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	0,006	0,013	0,043	0,009	0,025	0,013	0,004	-0,006	0,126	0,020	0,159	0,005
107Ag (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	0,151	0,511	0,289	0,508	0,393	0,424	0,386	0,006	0,032	0,045	0,038	0,000
111Cd   111Cd (M-TQ-O2)	Conc. [ ppb ]	0,325	0,416	0,357	0,170	0,122	0,328	0,223	0,013	1,437	0,554	0,065	0,078
115In (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	0,040	0,100	0,058	0,019	0,021	0,049	0,045	0,000	0,002	0,010	0,007	0,002
118Sn (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	5,648	9,597	6,680	4,869	3,293	8,616	5,610	-0,104	0,155	1,251	-0,128	-0,052
121Sb (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	-0,436	0,371	0,123	-1,070	-1,595	0,116	-0,619	-1,979	-1,147	-0,754	1,701	-2,048
125Te (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	-0,079	-0,079	-0,079	0,001	-0,079	-0,079	-0,079	-0,079	-0,079	-0,079	-0,079	-0,079
133Cs (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	0,407	0,389	0,276	0,259	0,155	0,213	0,175	0,125	0,971	0,504	0,794	0,069
138Ba (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	71,173	60,041	67,605	32,721	20,614	35,191	43,011	4,502	3,016	72,723	99,579	18,902

iCAP TQ ICP-MS		AW14	AW15	AW16	AW17	AW18	AW19	AW20	AW21	AW22	AW23	AW24	AW25
139La (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	1,854	10,922	2,154	0,706	0,805	0,977	1,606	0,051	0,035	3,654	0,055	0,030
140Ce (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	3,331	5,828	3,708	1,220	0,575	1,518	2,699	0,114	0,140	8,001	0,114	0,031
141Pr (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	0,409	0,719	0,477	0,136	0,064	0,158	0,343	0,013	0,011	0,965	0,016	0,004
146Nd (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	1,477	2,689	2,093	0,436	0,198	0,574	1,274	0,055	0,033	4,245	0,085	0,013
149Sm (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	0,379	0,546	0,335	0,091	0,045	0,053	0,237	0,011	0,013	0,961	0,004	0,003
153Eu (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	0,060	0,124	0,083	0,029	0,007	0,029	0,054	0,002	0,005	0,264	0,012	0,001
157Gd (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	0,430	0,816	0,593	0,809	0,121	0,424	0,408	0,073	0,043	0,981	0,258	0,000
159Tb (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	0,039	0,077	0,046	0,010	0,005	0,018	0,029	0,001	0,005	0,156	0,001	0,000
163Dy (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	0,202	0,385	0,260	0,076	0,027	0,076	0,154	0,004	0,077	0,901	0,011	0,004
165Ho (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	0,033	0,071	0,064	0,014	0,004	0,014	0,026	0,001	0,022	0,199	0,003	0,000
166Er (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	0,097	0,163	0,134	0,034	0,013	0,037	0,097	0,003	0,092	0,526	0,005	0,000
169Tm (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	0,015	0,025	0,017	0,006	0,003	0,006	0,013	0,001	0,021	0,071	0,002	0,000
172Yb (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	0,067	0,141	0,124	0,034	0,018	0,037	0,081	0,009	0,128	0,487	0,010	0,000
175Lu (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	0,006	0,019	0,026	0,005	0,001	0,002	0,016	0,002	0,025	0,064	0,001	0,000
178Hf (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	0,033	0,040	0,044	0,016	0,014	0,044	0,036	0,002	0,003	0,091	0,008	0,000
181Ta (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	0,014	0,014	0,009	0,005	0,009	0,008	0,008	0,009	0,037	0,020	0,008	0,005
182W (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	0,448	0,496	0,554	0,301	0,146	0,558	0,268	0,013	0,773	0,453	0,732	0,060
185Re (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	0,010	0,033	0,013	0,030	0,008	0,016	0,007	0,014	0,047	0,021	0,048	0,002
193Ir (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	-0,025	-0,012	-0,017	0,036	0,060	0,011	-0,020	-0,016	0,112	-0,013	-0,018	1,233
195Pt (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	0,010	0,011	0,015	0,011	0,011	0,068	0,010	0,002	0,019	0,004	0,004	0,014
197Au (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]												
202Hg   202Hg (M-TQ-O2)	Conc. [ ppb ]	0,025	0,170	0,055	0,017	0,029	0,058	0,063	-0,001	0,001	0,044	0,012	0,001
205Tl (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	0,033	0,054	0,052	0,016	0,019	0,048	0,039	0,009	0,038	0,045	0,624	0,008
208Pb (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	28,638	30,398	29,948	8,220	12,778	14,647	20,688	0,490	1,806	14,868	1,045	1,640
209Bi (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	3,546	3,676	3,460	4,417	3,034	6,665	2,367	-0,007	0,123	0,125	0,001	-0,002
232Th (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	0,277	0,530	0,229	0,049	0,036	0,173	0,190	0,010	0,008	0,950	0,015	0,000
238U (M-SQ-KED)	Conc. [ ppb ]	0,818	0,536	1,030	0,369	0,303	0,298	0,368	0,112	6,644	1,379	2,928	0,057