

Supplementary Information

A molecular self-assembled colourimetric chemosensor array for simultaneous detection of metal ions in water

Yui Sasaki^{a,b}, Tsukuru Minamiki^a, Shizuo Tokito^b and Tsuyoshi Minami^{a,*}

^a Institute of Industrial Science, The University of Tokyo, 4-6-1 Komaba, Meguro-ku, Tokyo, 153-8505, Japan. E-mail: tminami@iis.u-tokyo.ac.jp

^b Research Center for Organic Electronics (ROEL), Graduate School of Science and Engineering, Yamagata University, 4-3-16 Jonan, Yonezawa, Yamagata 992-8510, Japan.

Contents

1. General	S2
2. UV-vis Titration for Metal Ions	S4
3. FAB MS Analysis	S15
4. Job's Plot	S18
5. Linear Discriminant Analysis (LDA)	S19
6. Input / Output Datasets of the Quantitative Assay	S22
7. References	S55

1. *General*

Alizarin red S (ARS) , Potassium perchlorate (K^+), Sodium perchlorate (Na^+), Gallium(III) nitrate (Ga^{3+}) and Sodium chloride were purchased from Wako Pure Chemical Industries, Ltd. Cobalt(II) perchlorate hexahydrate (Co^{2+}), Calcium perchlorate tetrahydrate (Ca^{2+}), Lead(II) perchlorate trihydrate (Pb^{2+}), Barium perchlorate trihydrate (Ba^{2+}), Cadmium perchlorate hydrate (Cd^{2+}), Nickel(II) perchlorate hexahydrate (Ni^{2+}), Copper(II) perchlorate hexahydrate (Cu^{2+}), Magnesium perchlorate hexahydrate (Mg^{2+}), Aluminum perchlorate nonahydrate (Al^{3+}) and Zinc perchlorate hexahydrate (Zn^{2+}) were purchased from Sigma-Aldrich. 3-Nitrophenylbionic acid (3-NPBA), Bromopyrogallol red (BPR), and Pyrogallol red (PR) were purchased from Tokyo Chemical Industry Co., Ltd. Iron(II) chloride tetrahydrate (Fe^{2+}) and 4-(2-hydroxyethyl)-1-piperazineethanesulfonic acid (HEPES) were purchased from Kanto Chemical Co. Inc. and DOJINDO, respectively. Diluted solutions used for all photophysical experiments were prepared using Mill-Q water.

UV-vis spectra were measured by a Shimadzu UV-2600 spectrophotometer. UV-vis spectra recorded from 250 nm to 800 nm. Titration isotherms were constructed from changes in the absorption maxima. The data analysis for binding constants was performed according to published methods.¹ Mass spectrometry was performed using a JEOL JMS-600H instrument (FAB, matrix: 3-nitrobenzylalcohol (3-NBA)).

The array experiments for qualitative and quantitative analyses were performed in 384-well microplates using a Molecular Devices aquaMax DW4 robotic dispenser. The fluids (HEPES buffer (50 mM), NaCl (10 mM) at pH 7.4), ARS, BPR, PR (40 μ M), 3-NPBA (4 mM) and analyte solutions) were contact-free dispensed as follows. Each experiment was performed in 24 repetitions. Each well received 90 μ L of the buffer solution containing the dye and 3-NPBA. Subsequently, 10 μ L of analyte solutions or water were dispensed. After this period, the plate was shook for 30 s. Absorption spectra were measured by a Biotek SYNERGY H1 microplate reader. The absorption spectra were recorded from 400 nm to 700 nm. The resulting spectra data were subjected to the Student's t-test to exclude 4 outlier data-points (of 24 repetitions). The coefficient of variability among the data within the class of 20 repetitions was lower than 9%. The obtained data for qualitative and semi-quantitative analyses were then analyzed using LDA² without any further pretreatment. A support vector machine³ with a principal component analysis and an autoscale preprocessing was used for a quantitative assay.

2. Selected UV-vis titration for metal ions

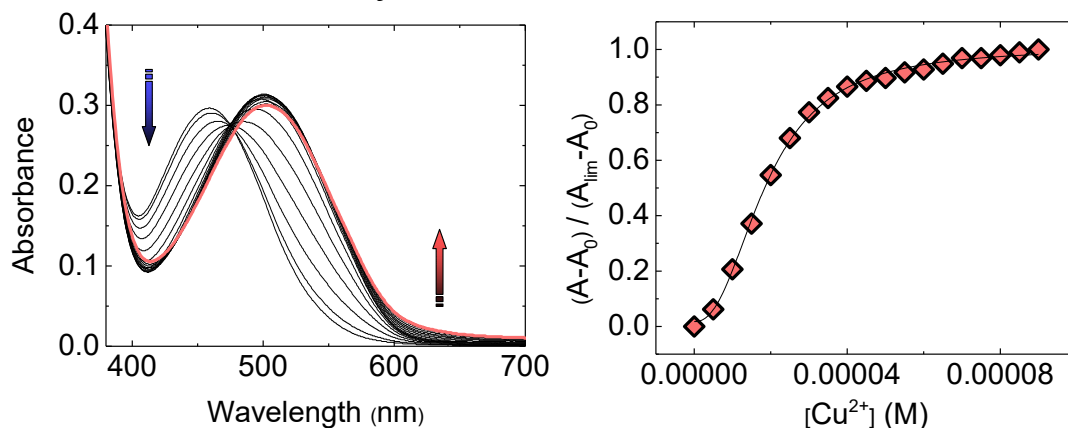


Fig. S1 UV-vis spectra of ARS (40 μM)–3-NPBA (4 mM) upon addition of Cu²⁺ in a HEPES buffer solution (50 mM) at pH 7.4 at r.t. [Cu²⁺] = 0–90 μM.

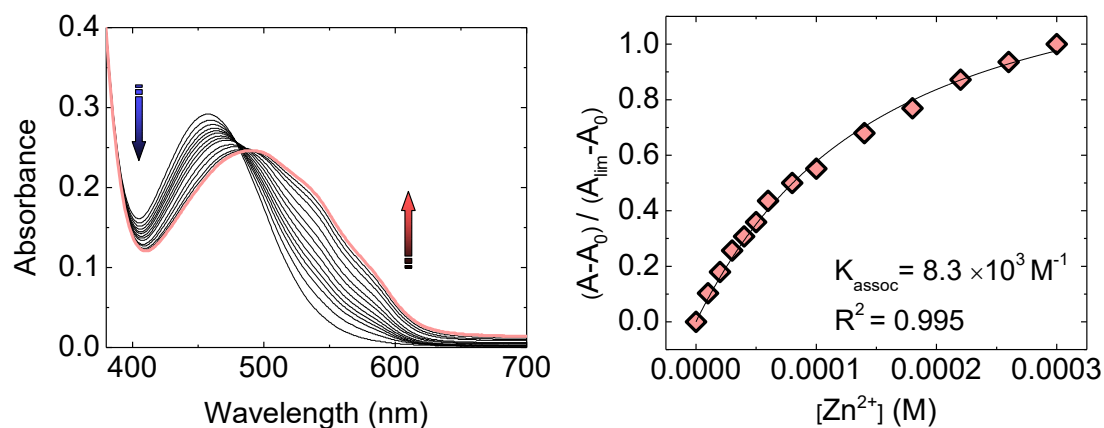


Fig. S2 UV-vis spectra of ARS (40 μM)–3-NPBA (4 mM) upon addition of Zn²⁺ in a HEPES buffer solution (50 mM) at pH 7.4 at r.t. [Zn²⁺] = 0–300 μM.

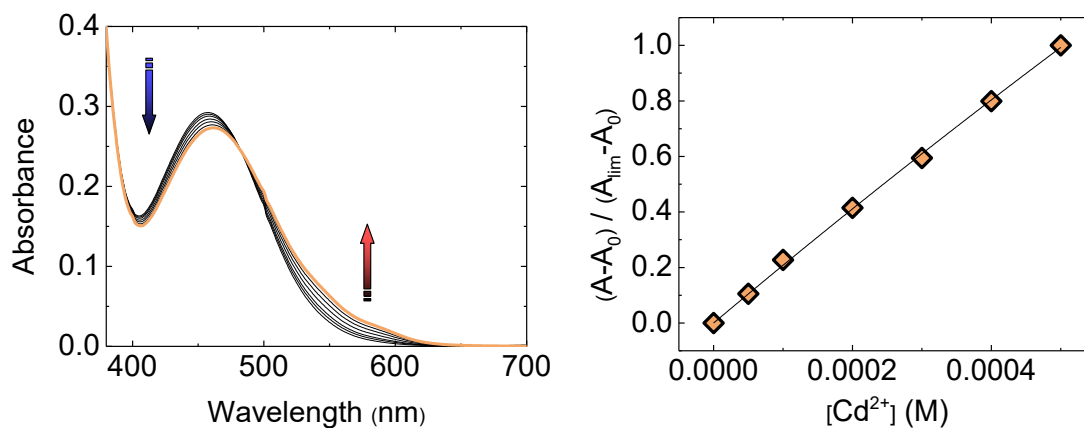


Fig. S3 UV-vis spectra of ARS (40 μM)–3-NPBA (4 mM) upon addition of Cd²⁺ in a HEPES buffer solution (50 mM) at pH 7.4 at r.t. [Cd²⁺] = 0–500 μM.

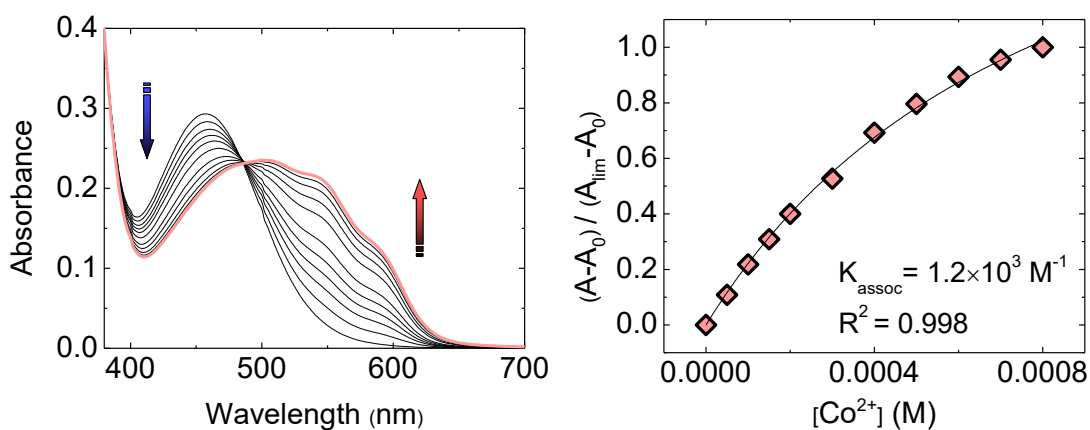


Fig. S4 UV-vis spectra of ARS (40 μM)–3-NPBA (4 mM) upon addition of Co²⁺ in a HEPES buffer solution (50 mM) at pH 7.4 at r.t. [Co²⁺] = 0–800 μM.

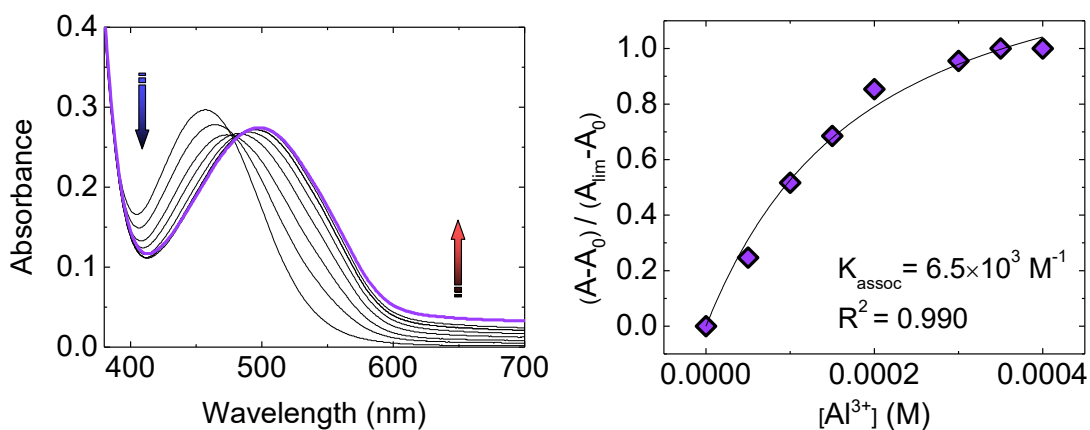


Fig. S5 UV-vis spectra of ARS (40 μM)–3-NPBA (4 mM) upon addition of Al³⁺ in a HEPES buffer solution (50 mM) at pH 7.4 at r.t. [Al³⁺] = 0–400 μM.

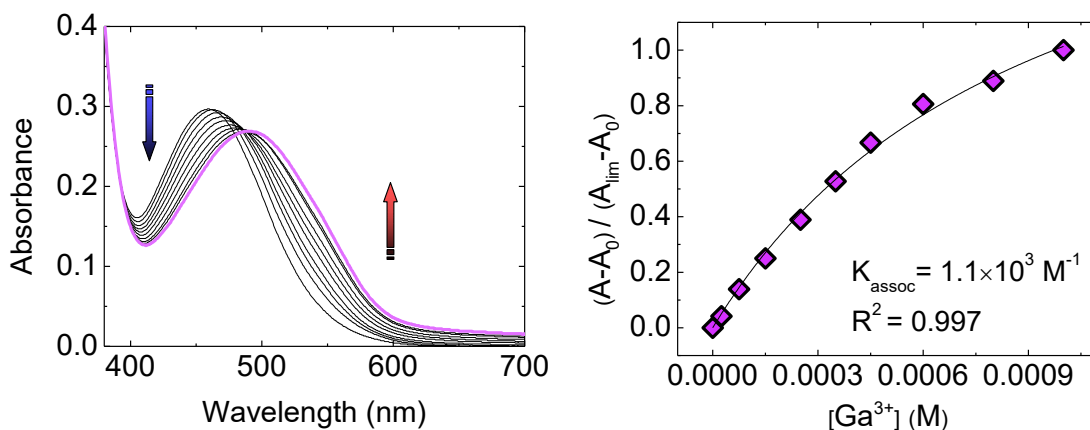


Fig. S6 UV-vis spectra of ARS (40 μM)–3-NPBA (4 mM) upon addition of Ga³⁺ in a HEPES buffer solution (50 mM) at pH 7.4 at r.t. [Ga³⁺] = 0–1000 μM.

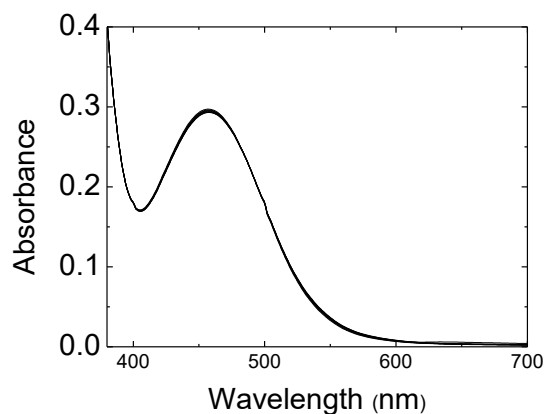


Fig. S7 UV-vis spectra of ARS (40 μM)–3-NPBA (4 mM) upon addition of Mg^{2+} in a HEPES buffer solution (50 mM) at pH 7.4 at r.t. [Mg^{2+}] = 0–500 μM .

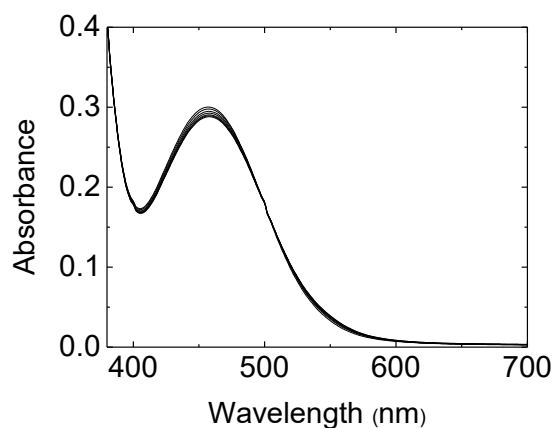


Fig. S8 UV-vis spectra of ARS (40 μM)–3-NPBA (4 mM) upon addition of Ba^{2+} in a HEPES buffer solution (50 mM) at pH 7.4 at r.t. [Ba^{2+}] = 0–500 μM .

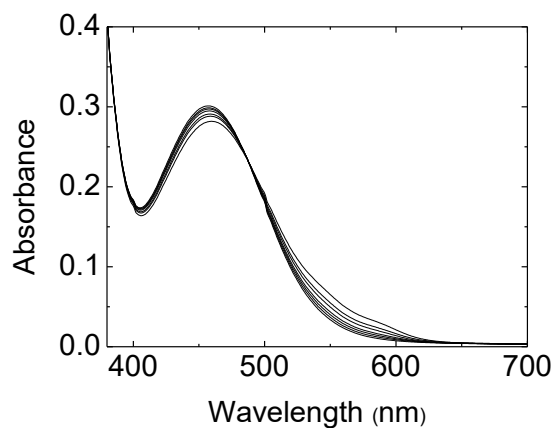


Fig. S9 UV-vis spectra of ARS (40 μM)–3-NPBA (4 mM) upon addition of Ca^{2+} in a HEPES buffer solution (50 mM) at pH 7.4 at r.t. [Ca^{2+}] = 0–500 μM .

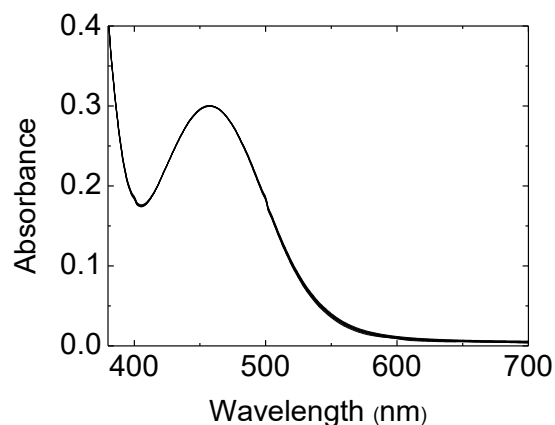


Fig. S10 UV-vis spectra of ARS (40 μM)–3-NPBA (4 mM) upon addition of Na^+ in a HEPES buffer solution (50 mM) at pH 7.4 at r.t. $[\text{Na}^+] = 0 - 500 \mu\text{M}$.

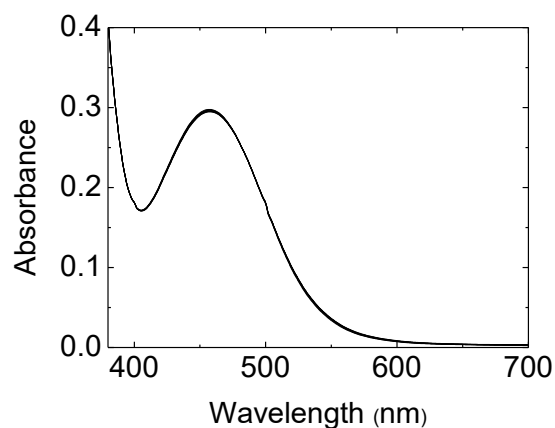


Fig. S11 UV-vis spectra of ARS (40 μM)–3-NPBA (4 mM) upon addition of K^+ in a HEPES buffer solution (50 mM) at pH 7.4 at r.t. $[\text{K}^+] = 0 - 500 \mu\text{M}$.

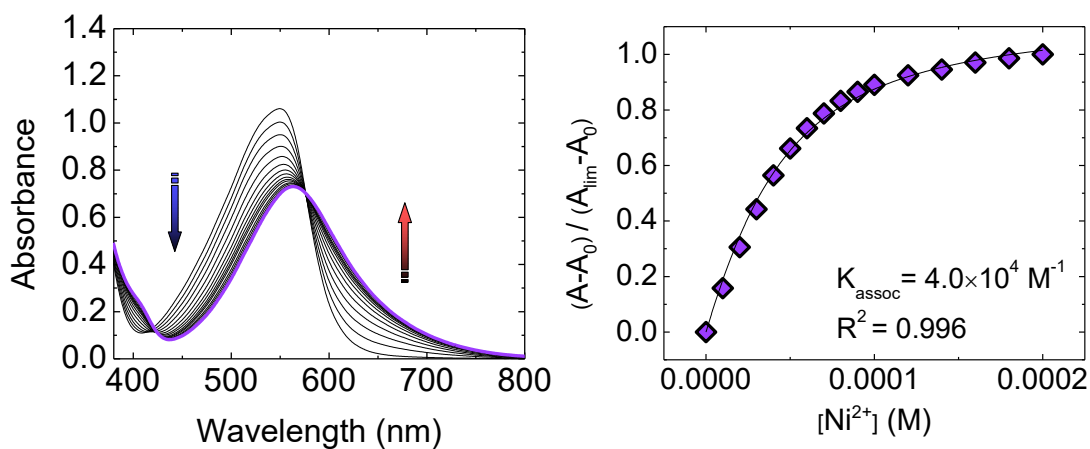


Fig. S12 UV-vis spectra of BPR (40 μM)–3-NPBA (4 mM) upon addition of Ni^{2+} in a HEPES buffer solution (50 mM) at pH 7.4 at r. $[\text{Ni}^{2+}] = 0 - 200 \mu\text{M}$.

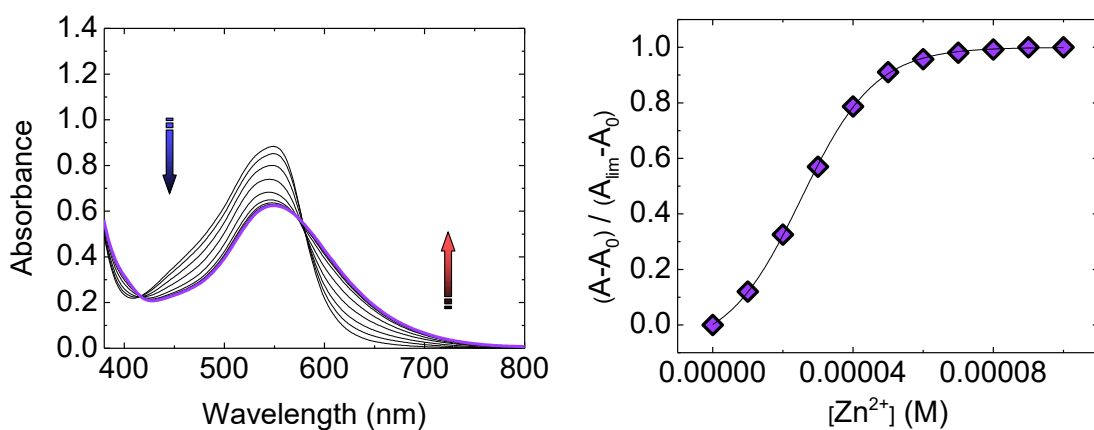


Fig. S13 UV-vis spectra of BPR (40 μM)–3-NPBA (4 mM) upon addition of Zn²⁺ in a HEPES buffer solution (50 mM) at pH 7.4 at r.t. [Zn²⁺] = 0–100 μM.

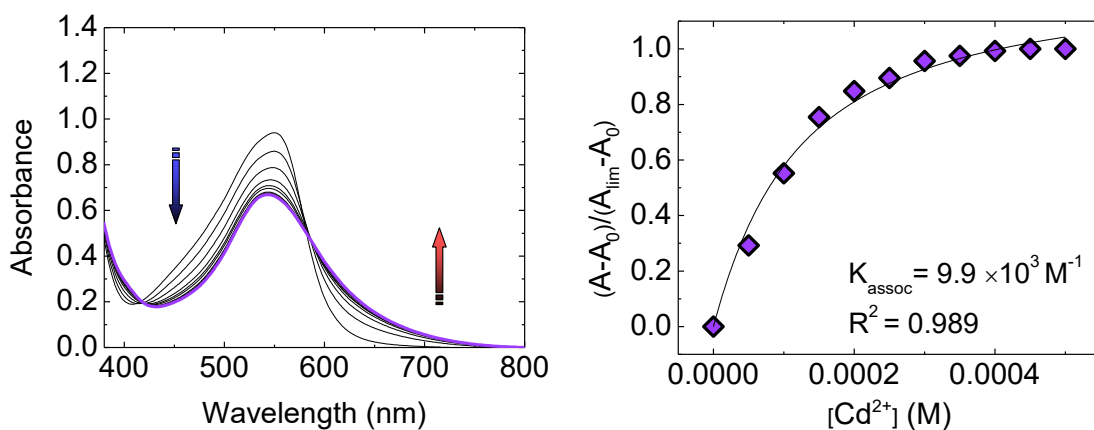


Fig. S14 UV-vis spectra of BPR (40 μM)–3-NPBA (4 mM) upon addition of Cd²⁺ in a HEPES buffer solution (50 mM) at pH 7.4 at r.t. [Cd²⁺] = 0–500 μM.

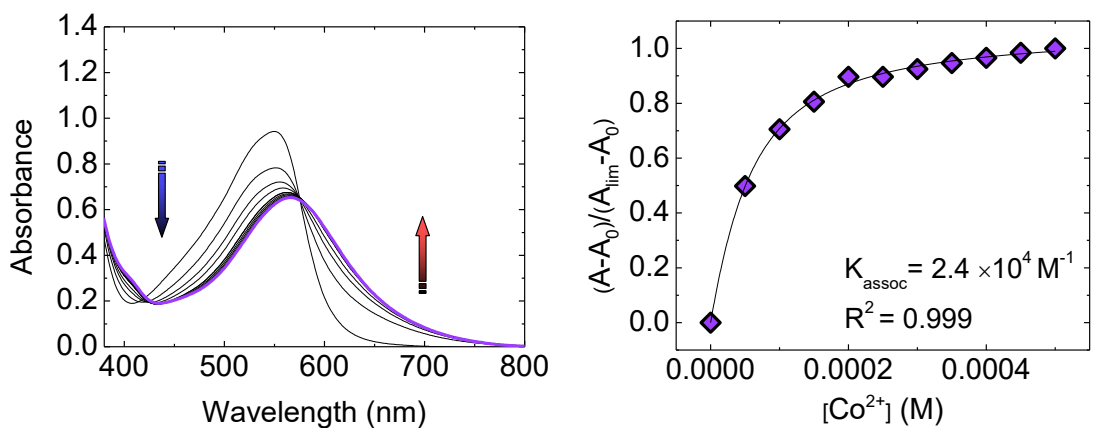


Fig. S15 UV-vis spectra of BPR (40 μM)–3-NPBA (4 mM) upon addition of Co²⁺ in a HEPES buffer solution (50 mM) at pH 7.4 at r.t. [Co²⁺] = 0–500 μM.

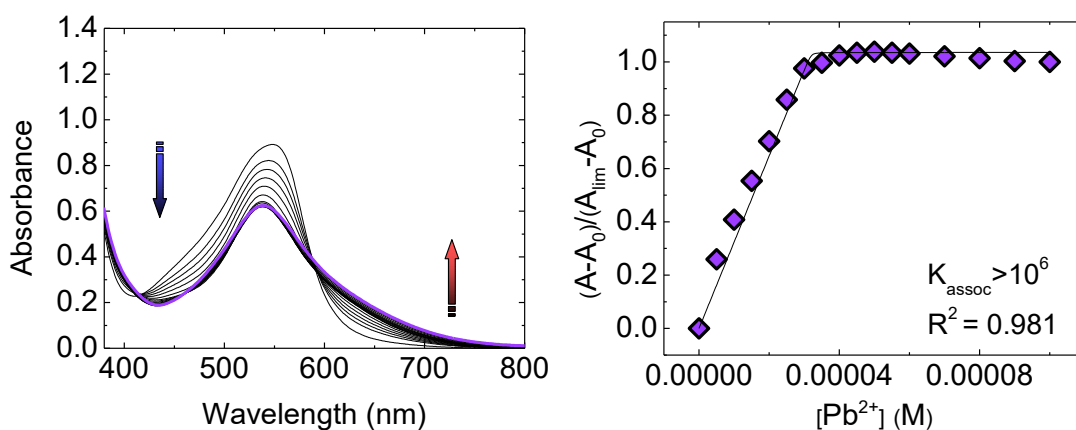


Fig. S16 UV-vis spectra of BPR (40 μM)–3-NPBA (4 mM) upon addition of Pb²⁺ in a HEPES buffer solution (50 mM) at pH 7.4 at r.t. [Pb²⁺] = 0–100 μM.

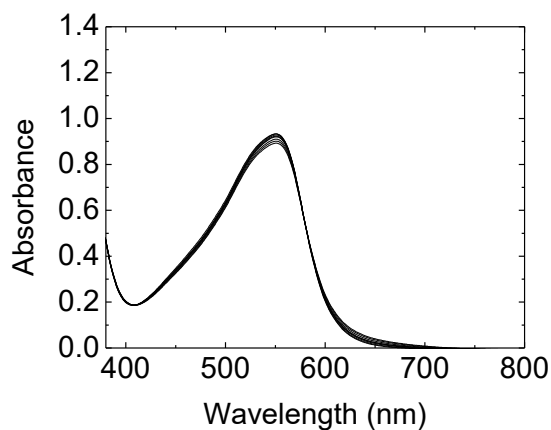


Fig. S17 UV-vis spectra of BPR (40 μM)–3-NPBA (4 mM) upon addition of Mg²⁺ in a HEPES buffer solution (50 mM) at pH 7.4 at r.t. [Mg²⁺] = 0–500 μM.

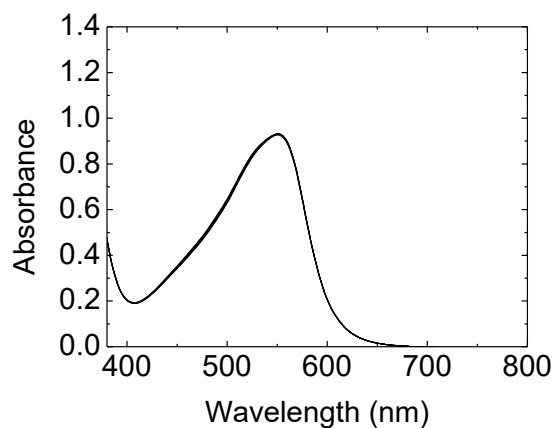


Fig. S18 UV-vis spectra of BPR (40 μM)–3-NPBA (4 mM) upon addition of Ba²⁺ in a HEPES buffer solution (50 mM) at pH 7.4 at r.t. [Ba²⁺] = 0–500 μM.

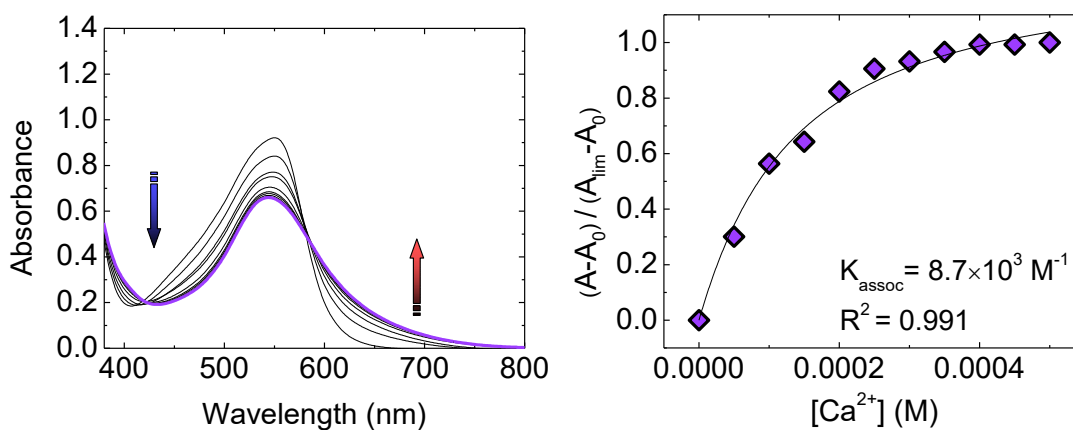


Fig. S19 UV-vis spectra of BPR (40 μM)–3-NPBA (4 mM) upon addition of Ca^{2+} in a HEPES buffer solution (50 mM) at pH 7.4 at r.t. [Ca^{2+}] = 0–500 μM .

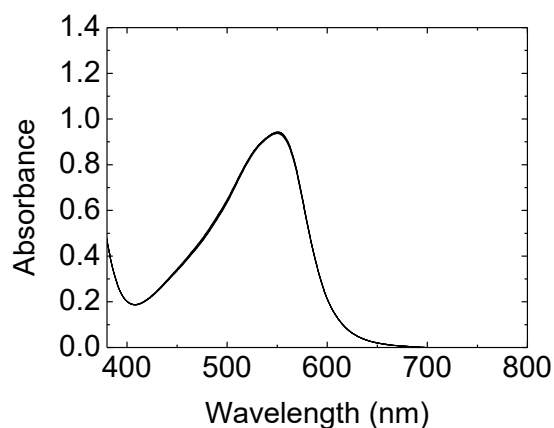


Fig. S20 UV-vis spectra of BPR (40 μM)–3-NPBA (4 mM) upon addition of Na^+ in a HEPES buffer solution (50 mM) at pH 7.4 at r.t. [Na^+] = 0–500 μM .

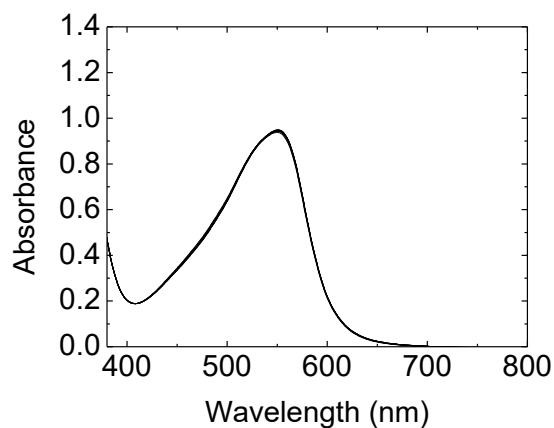


Fig. S21 UV-vis spectra of BPR (40 μM)–3-NPBA (4 mM) upon addition of K^+ in a HEPES buffer solution (50 mM) at pH 7.4 at r.t. [K^+] = 0–500 μM .

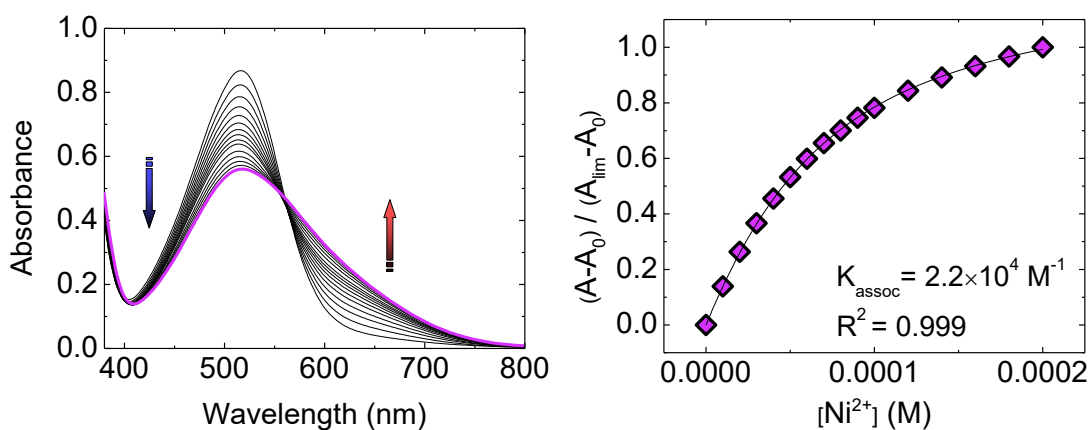


Fig. S22 UV-vis spectra of PR (40 μM)–3-NPBA (4 mM) upon addition of Ni²⁺ in a HEPES buffer solution (50 mM) at pH 7.4 at r.t. [Ni²⁺] = 0–200 μM.

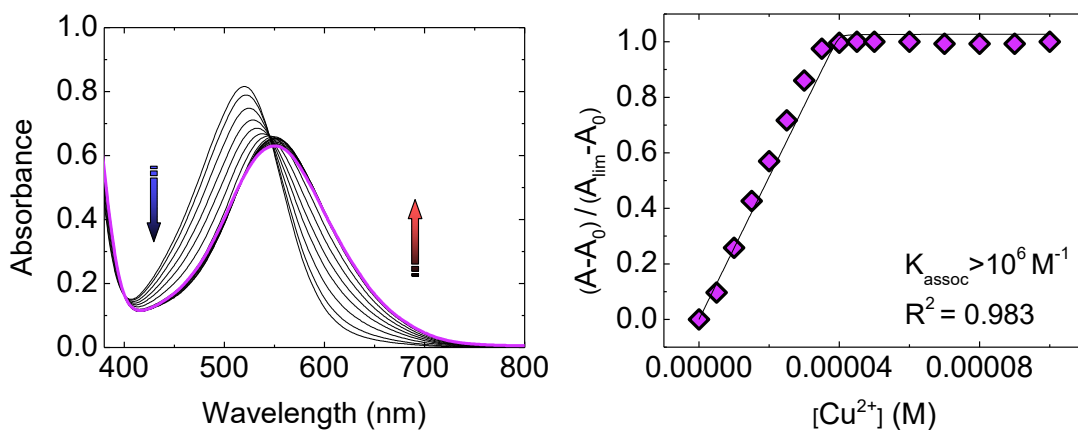


Fig. S23 UV-vis spectra of PR (40 μM)–3-NPBA (4 mM) upon addition of Cu²⁺ in a HEPES buffer solution (50 mM) at pH 7.4 at r.t. [Cu²⁺] = 0–100 μM.

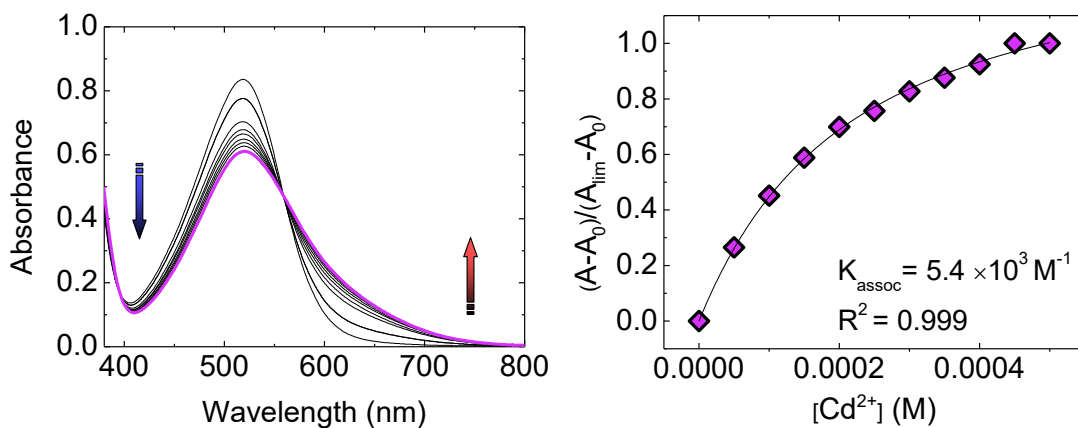


Fig. S24 UV-vis spectra of PR (40 μM)–3-NPBA (4 mM) upon addition of Cd²⁺ in a HEPES buffer solution (50 mM) at pH 7.4 at r.t. [Cd²⁺] = 0–500 μM.

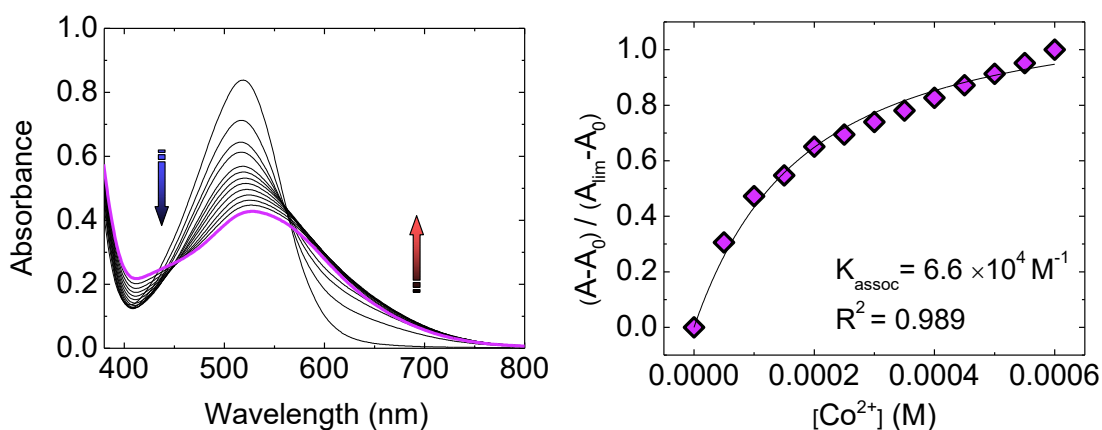


Fig. S25 UV-vis spectra of PR (40 μM)–3-NPBA (4 mM) upon addition of Co²⁺ in a HEPES buffer solution (50 mM) at pH 7.4 at r.t. [Co²⁺] = 0–600 μM.

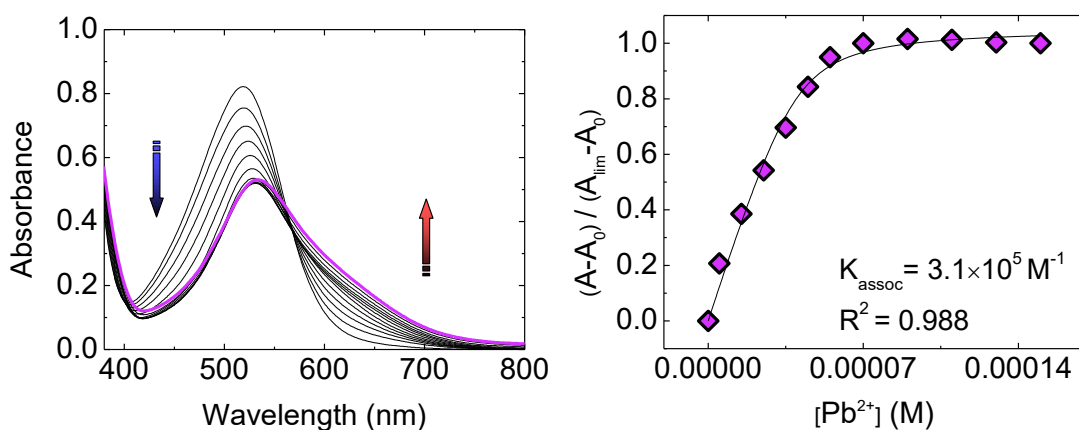


Fig. S26 UV-vis spectra of PR (40 μM)–3-NPBA (4 mM) upon addition of Pb²⁺ in a HEPES buffer solution (50 mM) at pH 7.4 at r.t. [Pb²⁺] = 0–150 μM.

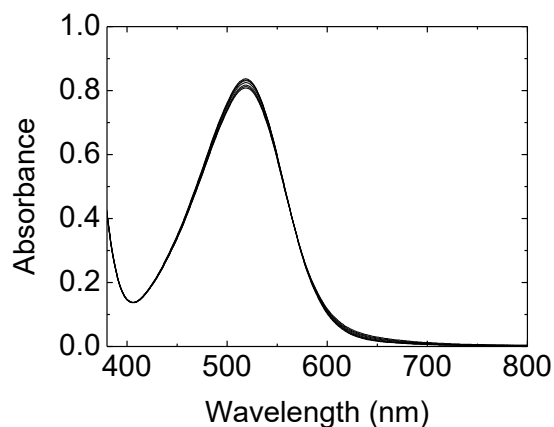


Fig. S27 UV-vis spectra of PR (40 μM)–3-NPBA (4 mM) upon addition of Mg²⁺ in a HEPES buffer solution (50 mM) at pH 7.4 at r.t. [Mg²⁺] = 0–500 μM.

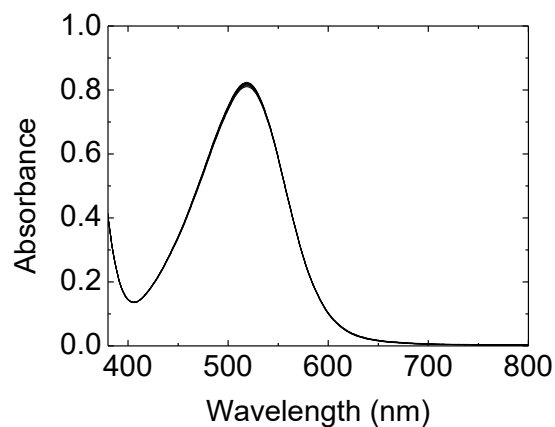


Fig. S28 UV-vis spectra of PR (40 μM)–3-NPBA (4 mM) upon addition of Ba^{2+} in a HEPES buffer solution (50 mM) at pH 7.4 at r.t. [Ba^{2+}] = 0–500 μM .

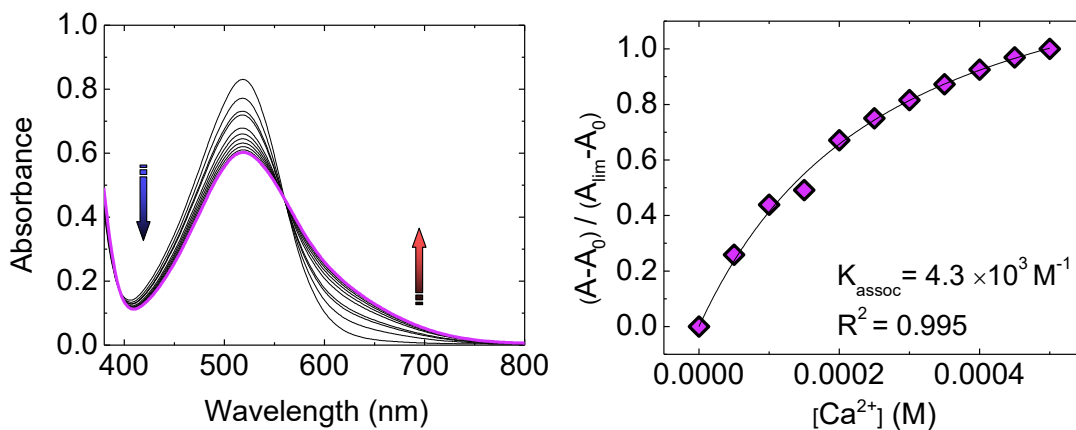


Fig. S29 UV-vis spectra of PR (40 μM)–3-NPBA (4 mM) upon addition of Ca^{2+} in a HEPES buffer solution (50 mM) at pH 7.4 at r.t. [Ca^{2+}] = 0–500 μM .

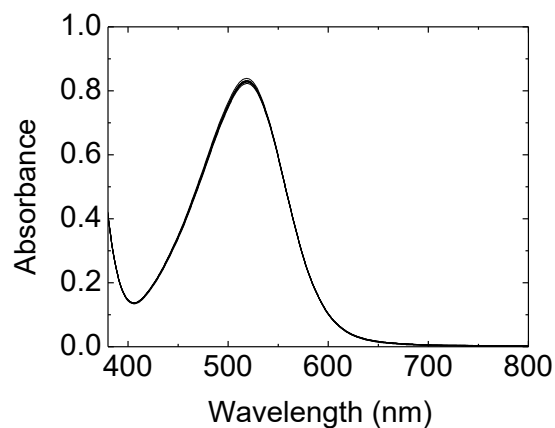


Fig. S30 UV-vis spectra of PR (40 μM)–3-NPBA (4 mM) upon addition of Na^{+} in a HEPES buffer solution (50 mM) at pH 7.4 at r.t. [Na^{+}] = 0–500 μM .

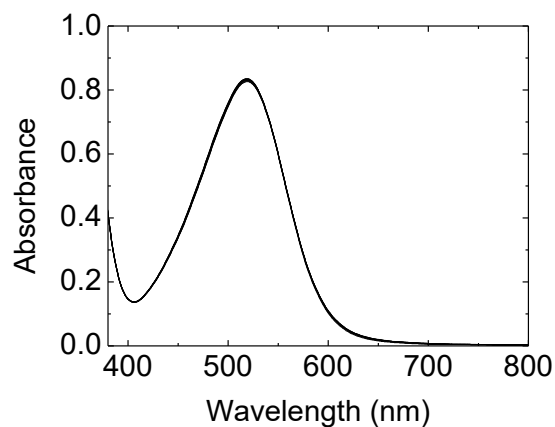


Fig. S31 UV-vis spectra of PR (40 μM)–3-NPBA (4 mM) upon addition of K^+ in a HEPES buffer solution (50 mM) at pH 7.4 at r.t. [K^+] = 0–500 μM .

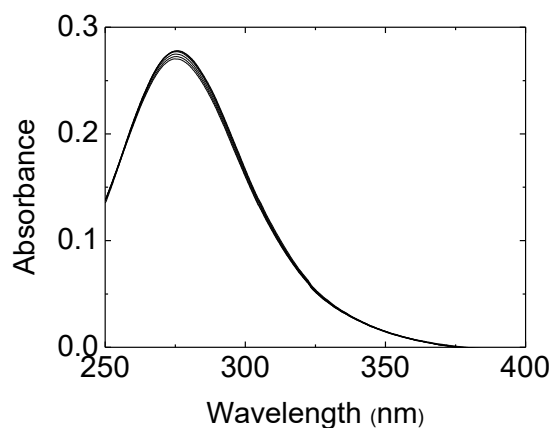


Fig. S32 UV-vis spectra of 3-NPBA (40 μM) upon addition of Ni^{2+} in a HEPES buffer solution (50 mM) at pH 7.4 at r.t. [Ni^{2+}] = 0–100 μM .

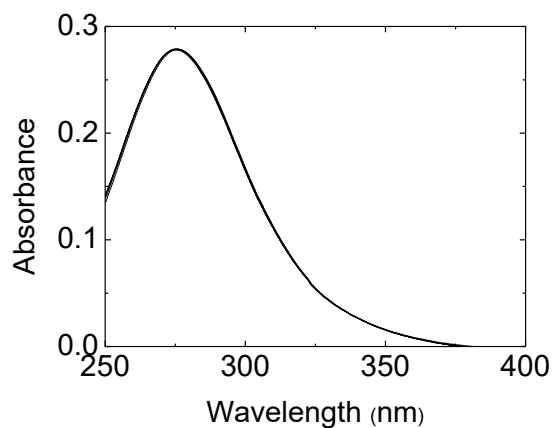


Fig. S33 UV-vis spectra of 3-NPBA (40 μM) upon addition of Zn^{2+} in a HEPES buffer solution (50 mM) at pH 7.4 at r.t. [Zn^{2+}] = 0–100 μM .

3. FAB MS Analysis

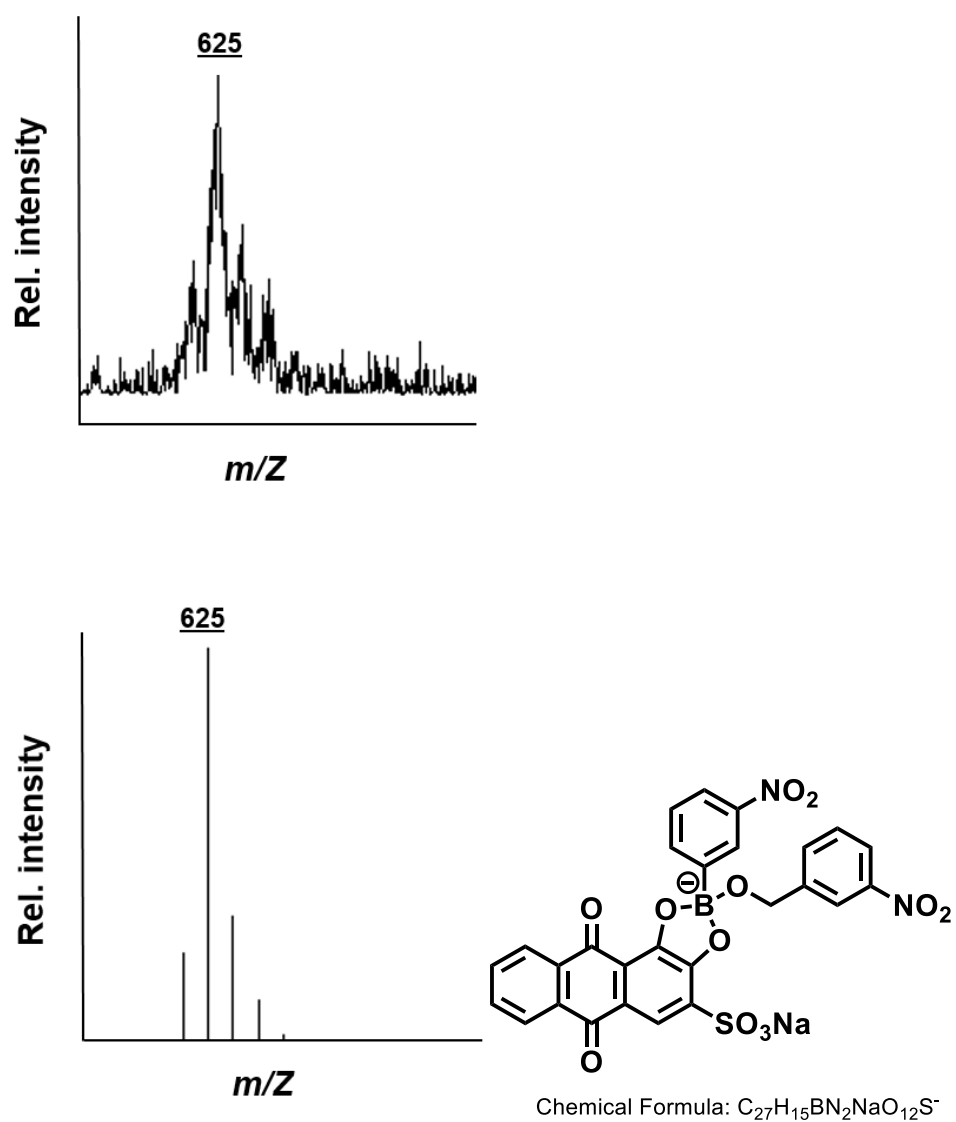
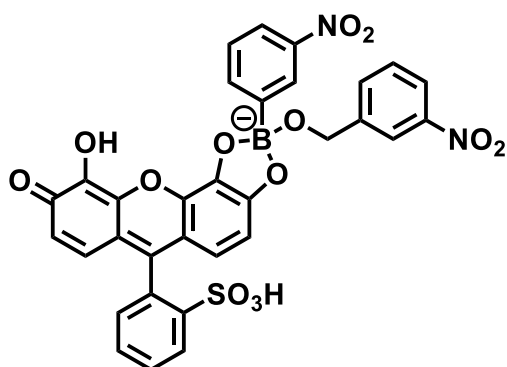
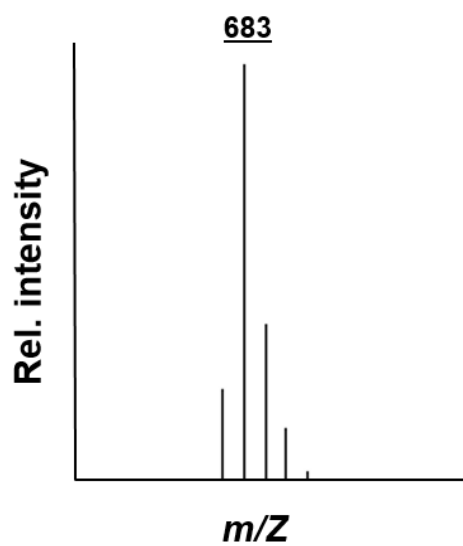
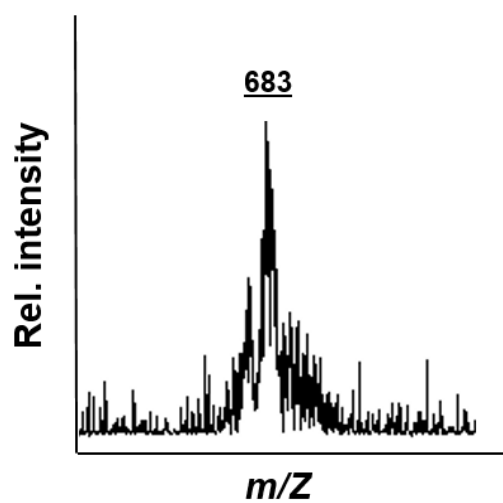


Fig. S34 Top: FAB MS (negative) spectra of the ARS-3-NBPA complex. **Bottom:** Calculated isotope pattern for $[ARS-2H_2O+3-NPBA+3-NBA-H]^-$.



Chemical Formula: $C_{32}H_{20}BN_2O_{13}S^-$

Fig. S35 Top: FAB MS (negative) spectra of the PR-3-NBPA complex. **Bottom:** Calculated isotope pattern for $[PR-2H_2O+3-NPBA+3-NBA-H]^-$.

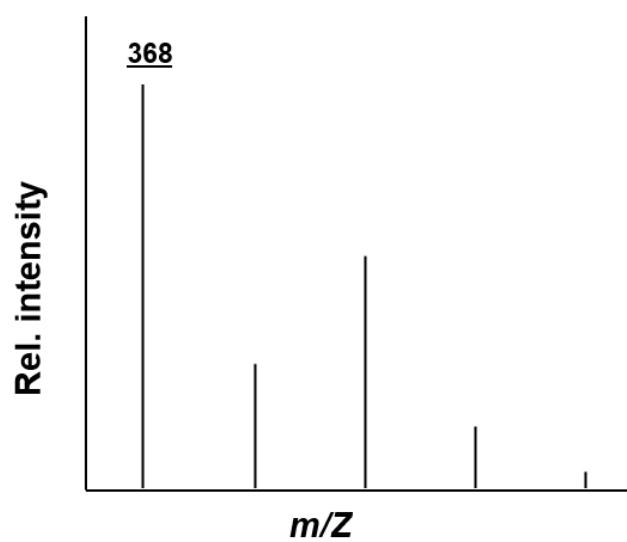
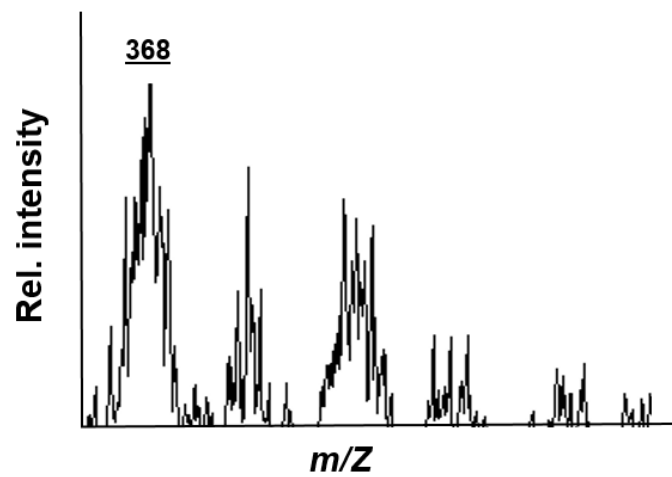


Fig. S36 Top: FAB MS (positive) spectra of the PR-Cu²⁺ complex **Bottom:** Calculated isotope pattern for [PR-3H+Cu²⁺+3Na⁺+3-NBA+3H₂O]²⁺

4. Job's Plot

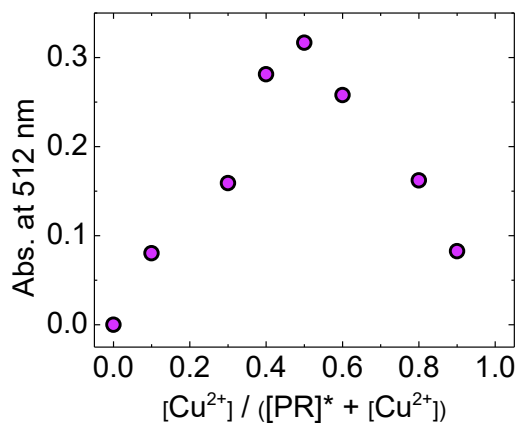


Fig. S37 Job's plot of [PR-Cu²⁺] complex *versus* the molar fraction [Cu²⁺]/([PR]^{*}+ [Cu²⁺]) at constant ([PR]+[Cu²⁺]) (40 μM). [PR]^{*} contains 3-NPBA (4 mM).

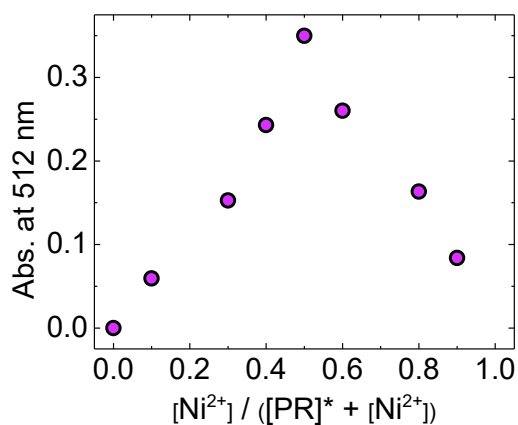


Fig. S38 Job's plot of [PR-Ni²⁺] complex *versus* the molar fraction [Ni²⁺]/([PR]^{*}+ [Ni²⁺]) at constant ([PR]+[Ni²⁺]) (40 μM). [PR]^{*} contains 3-NPBA (4 mM).

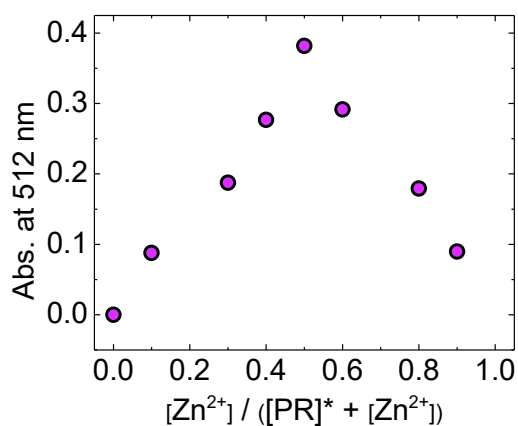


Fig. S39 Job's plot of [PR-Zn²⁺] complex *versus* the molar fraction [Zn²⁺]/([PR]^{*}+ [Zn²⁺]) at constant ([PR]+[Zn²⁺]) (40 μM). [PR]^{*} contains 3-NPBA (4 mM).

5. Linear Discriminant Analysis (LDA)

Table S1 The jackknifed classification matrix of qualitative assay

Jackknifed Classification Matrix													
	Al ³⁺	Ca ²⁺	Cd ²⁺	Co ²⁺	Cu ²⁺	Fe ²⁺	Ga ³⁺	Hg ²⁺	Ni ²⁺	Pb ²⁺	Zn ²⁺	control	%correct
Al ³⁺	20	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	100
Ca ²⁺	0	20	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	100
Cd ²⁺	0	0	20	0	0	0	0	0	0	0	0	0	100
Co ²⁺	0	0	0	20	0	0	0	0	0	0	0	0	100
Cu ²⁺	0	0	0	0	20	0	0	0	0	0	0	0	100
Fe ²⁺	0	0	0	0	0	20	0	0	0	0	0	0	100
Ga ³⁺	0	0	0	0	0	0	20	0	0	0	0	0	100
Hg ²⁺	0	0	0	0	0	0	0	20	0	0	0	0	100
Ni ²⁺	0	0	0	0	0	0	0	0	20	0	0	0	100
Pb ²⁺	0	0	0	0	0	0	0	0	0	20	0	0	100
Zn ²⁺	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	20	0	100
control	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	20	100
Total	20	20	20	20	20	20	20	20	20	20	20	20	100

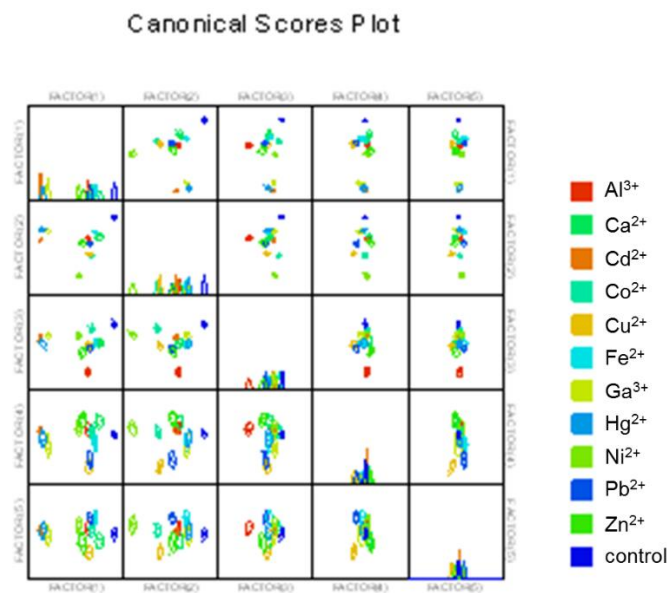


Fig. S40 The canonical score plot of qualitative assay.

Table S2 The jackknifed classification matrix of semi-quantitative assay

	Cu-0.4 ppm	Cu-1.1 ppm	Cu-1.9 ppm	Cu-2.6 ppm	Cu-3.7 ppm	Ni-0.4 ppm	Ni-1.1 ppm	Ni-1.8 ppm	Ni-2.8 ppm	Ni-3.7 ppm
Cu-0.4 ppm	20	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Cu-1.1 ppm	0	20	0	0	0	0	0	0	0	0
Cu-1.9 ppm	0	0	20	0	0	0	0	0	0	0
Cu-2.6 ppm	0	0	0	20	0	0	0	0	0	0
Cu-3.7 ppm	0	0	0	0	20	0	0	0	0	0
Ni-0.4 ppm	0	0	0	0	0	20	0	0	0	0
Ni-1.1 ppm	0	0	0	0	0	0	20	0	0	0
Ni-1.8 ppm	0	0	0	0	0	0	0	20	0	0
Ni-2.8 ppm	0	0	0	0	0	0	0	0	20	0
Ni-3.7 ppm	0	0	0	0	0	0	0	0	0	20
Zn-0.4 ppm	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Zn-1.1 ppm	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Zn-1.9 ppm	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Zn-2.7 ppm	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Zn-3.7 ppm	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
control	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Total	20	20	20	20	20	20	20	20	20	20

Jackknifed Classification Matrix (contd...)							
	Zn-0.4 ppm	Zn-1.1 ppm	Zn-1.9 ppm	Zn-2.7 ppm	Zn-3.7 ppm	control	%correct
Cu-0.4 ppm	0	0	0	0	0	0	100
Cu-1.1 ppm	0	0	0	0	0	0	100
Cu-1.9 ppm	0	0	0	0	0	0	100
Cu-2.6 ppm	0	0	0	0	0	0	100
Cu-3.7 ppm	0	0	0	0	0	0	100
Ni-0.4 ppm	0	0	0	0	0	0	100
Ni-1.1 ppm	0	0	0	0	0	0	100
Ni-1.8 ppm	0	0	0	0	0	0	100
Ni-2.8 ppm	0	0	0	0	0	0	100
Ni-3.7 ppm	0	0	0	0	0	0	100
Zn-0.4 ppm	20	0	0	0	0	0	100
Zn-1.1 ppm	0	20	0	0	0	0	100
Zn-1.9 ppm	0	0	20	0	0	0	100
Zn-2.7 ppm	0	0	0	20	0	0	100
Zn-3.7 ppm	0	0	0	0	20	0	100
control	0	0	0	0	0	20	100
Total	20	20	20	20	20	20	100

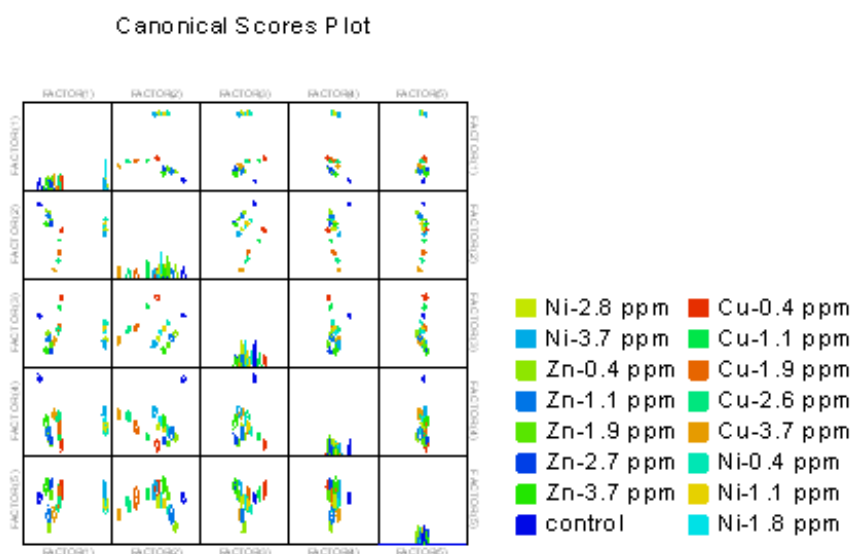


Fig. S41 The canonical score plot of semi-quantitative assay.

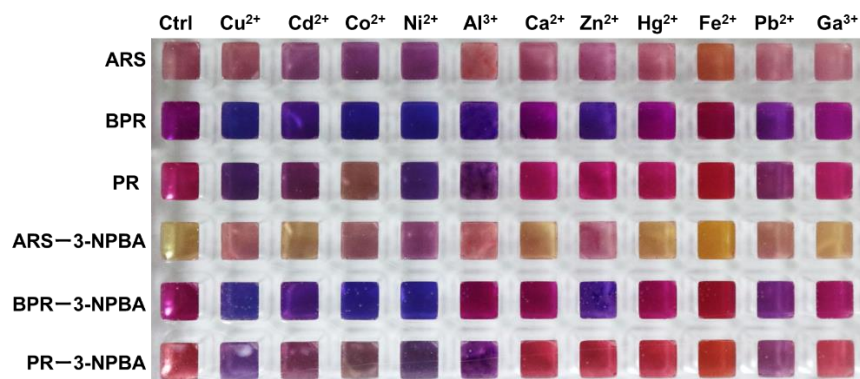


Fig. S42 A photograph of a stand-alone dye array and the self-assembled chemosensor array in the presence or absence of metal ions at pH 7.4 at r.t. [HEPES] = 50 mM, [NaCl] = 10 mM, [dye] = 40 μ M. [3-NPBA] = 4 mM, [Metal ion] = 100 μ M.

Table S3 Concentration conditions in the quantitative assay of the mixtures. The gray lines mean validation data sets while white lines mean calibration data sets. All solutions contain HEPES (50 mM) and NaCl (10 mM) at pH 7.4 at r.t.

Cu ²⁺ (ppm)	Ni ²⁺ (ppm)	Zn ²⁺ (ppm)
2.3	30.0	5.6
1.9	25.0	4.6
1.5	20.0	3.7
1.1	15.0	2.8
0.8	10.0	1.9
0.5	7.0	1.3
0.4	5.0	0.9
0.2	3.0	0.6
0.1	1.0	0.2
0.0	0.0	0.0

6. Input / Output Datasets of the Quantitative Assay for Metal Ion Mixtures

Table S4 Input prediction dataset of the quantitative assay for Cu²⁺ / Ni²⁺ / Zn²⁺ mixtures in the presence of the interfering NaCl (10 mM)

Concentration Cu ²⁺ / Ni ²⁺ / Zn ²⁺	ARS									
	400 nm	420 nm	440 nm	460 nm	500 nm	520 nm	540 nm	560 nm	580 nm	600 nm
0 ppm / 0 ppm / 0 ppm	0.2000	0.2221	0.2680	0.3061	0.1940	0.1248	0.0790	0.0580	0.0490	0.0450
0 ppm / 0 ppm / 0 ppm	0.1930	0.2320	0.2682	0.2931	0.1910	0.1238	0.0790	0.0582	0.0489	0.0430
0 ppm / 0 ppm / 0 ppm	0.2020	0.2161	0.2762	0.2850	0.1980	0.1198	0.0800	0.0590	0.0490	0.0439
0 ppm / 0 ppm / 0 ppm	0.2018	0.2220	0.2740	0.2861	0.1920	0.1218	0.0790	0.0590	0.0480	0.0448
0 ppm / 0 ppm / 0 ppm	0.1998	0.2201	0.2670	0.2870	0.1870	0.1290	0.0780	0.0580	0.0509	0.0466
0 ppm / 0 ppm / 0 ppm	0.2058	0.2140	0.2840	0.2991	0.1930	0.1298	0.0810	0.0560	0.0470	0.0439
0 ppm / 0 ppm / 0 ppm	0.1950	0.2231	0.2690	0.2930	0.1930	0.1220	0.0790	0.0582	0.0479	0.0466
0 ppm / 0 ppm / 0 ppm	0.1970	0.2260	0.2672	0.3000	0.1940	0.1170	0.0810	0.0582	0.0489	0.0430
0 ppm / 0 ppm / 0 ppm	0.2090	0.2250	0.2742	0.2931	0.1860	0.1260	0.0820	0.0592	0.0469	0.0430
0 ppm / 0 ppm / 0 ppm	0.2010	0.2251	0.2802	0.2881	0.1840	0.1210	0.0780	0.0630	0.0510	0.0430
0 ppm / 0 ppm / 0 ppm	0.2000	0.2290	0.2800	0.2860	0.1990	0.1238	0.0800	0.0602	0.0480	0.0440
0 ppm / 0 ppm / 0 ppm	0.1978	0.2230	0.2872	0.2951	0.1980	0.1240	0.0820	0.0580	0.0470	0.0439
0 ppm / 0 ppm / 0 ppm	0.2088	0.2291	0.2692	0.2930	0.1850	0.1208	0.0790	0.0600	0.0479	0.0460
0 ppm / 0 ppm / 0 ppm	0.2018	0.2321	0.2752	0.3060	0.1900	0.1230	0.0820	0.0600	0.0500	0.0450
0 ppm / 0 ppm / 0 ppm	0.1948	0.2160	0.2870	0.3031	0.1870	0.1240	0.0800	0.0582	0.0490	0.0440
0 ppm / 0 ppm / 0 ppm	0.2060	0.2160	0.2750	0.3030	0.1990	0.1190	0.0800	0.0600	0.0469	0.0440
0 ppm / 0 ppm / 0 ppm	0.2008	0.2171	0.2770	0.2950	0.1910	0.1248	0.0850	0.0612	0.0480	0.0430
0 ppm / 0 ppm / 0 ppm	0.1928	0.2200	0.2842	0.3000	0.1920	0.1208	0.0810	0.0592	0.0479	0.0448
0 ppm / 0 ppm / 0 ppm	0.1950	0.2151	0.2802	0.2851	0.1870	0.1158	0.0860	0.0570	0.0509	0.0439
0 ppm / 0 ppm / 0 ppm	0.1948	0.2251	0.2800	0.3001	0.1890	0.1210	0.0790	0.0572	0.0479	0.0470
0.1 ppm / 1.0 ppm / 0.2 ppm	0.1910	0.2270	0.2690	0.2917	0.1861	0.1350	0.0810	0.0570	0.0508	0.0410
0.1 ppm / 1.0 ppm / 0.2 ppm	0.1940	0.2117	0.2630	0.2810	0.1980	0.1206	0.0810	0.0580	0.0478	0.0510
0.1 ppm / 1.0 ppm / 0.2 ppm	0.2037	0.2317	0.2860	0.3000	0.1901	0.1316	0.0808	0.0589	0.0480	0.0470
0.1 ppm / 1.0 ppm / 0.2 ppm	0.2047	0.2220	0.2648	0.2960	0.1840	0.1286	0.0897	0.0589	0.0568	0.0470
0.1 ppm / 1.0 ppm / 0.2 ppm	0.1990	0.2217	0.2797	0.2837	0.2030	0.1220	0.0840	0.0609	0.0460	0.0440
0.1 ppm / 1.0 ppm / 0.2 ppm	0.1950	0.2187	0.2770	0.2820	0.1851	0.1250	0.0818	0.0599	0.0458	0.0400
0.1 ppm / 1.0 ppm / 0.2 ppm	0.1980	0.2197	0.2730	0.2817	0.1931	0.1260	0.0798	0.0590	0.0520	0.0430
0.1 ppm / 1.0 ppm / 0.2 ppm	0.1948	0.2137	0.2820	0.2977	0.1921	0.1230	0.0790	0.0590	0.0450	0.0410
0.1 ppm / 1.0 ppm / 0.2 ppm	0.1968	0.2310	0.2720	0.3050	0.2031	0.1210	0.0818	0.0569	0.0478	0.0510
0.1 ppm / 1.0 ppm / 0.2 ppm	0.2060	0.2257	0.2757	0.2957	0.1911	0.1246	0.0857	0.0589	0.0480	0.0440

0.1 ppm / 1.0 ppm / 0.2 ppm	0.1928	0.2167	0.2730	0.2930	0.1990	0.1240	0.0800	0.0610	0.0560	0.0430
0.1 ppm / 1.0 ppm / 0.2 ppm	0.2040	0.2110	0.2728	0.2937	0.1910	0.1206	0.0788	0.0629	0.0480	0.0430
0.1 ppm / 1.0 ppm / 0.2 ppm	0.1988	0.2290	0.2867	0.3057	0.1930	0.1236	0.0820	0.0679	0.0498	0.0460
0.1 ppm / 1.0 ppm / 0.2 ppm	0.1978	0.2267	0.2630	0.2930	0.1971	0.1200	0.0860	0.0549	0.0518	0.0440
0.1 ppm / 1.0 ppm / 0.2 ppm	0.1910	0.2180	0.2628	0.3010	0.1890	0.1256	0.0760	0.0550	0.0449	0.0430
0.1 ppm / 1.0 ppm / 0.2 ppm	0.2080	0.2200	0.2807	0.2997	0.1900	0.1320	0.0758	0.0600	0.0510	0.0430
0.1 ppm / 1.0 ppm / 0.2 ppm	0.1960	0.2177	0.2698	0.2910	0.1971	0.1300	0.0800	0.0630	0.0478	0.0430
0.1 ppm / 1.0 ppm / 0.2 ppm	0.2087	0.2180	0.2738	0.2887	0.1930	0.1356	0.0900	0.0680	0.0480	0.0410
0.1 ppm / 1.0 ppm / 0.2 ppm	0.1908	0.2120	0.2810	0.2880	0.1901	0.1226	0.0838	0.0589	0.0490	0.0460
0.1 ppm / 1.0 ppm / 0.2 ppm	0.1938	0.2160	0.2728	0.2927	0.1840	0.1236	0.0798	0.0590	0.0478	0.0450
0.2 ppm / 3.0 ppm / 0.6 ppm	0.1989	0.2200	0.2770	0.2970	0.1961	0.1320	0.0893	0.0599	0.0479	0.0470
0.2 ppm / 3.0 ppm / 0.6 ppm	0.2019	0.2250	0.2772	0.2960	0.1920	0.1316	0.0820	0.0640	0.0569	0.0430
0.2 ppm / 3.0 ppm / 0.6 ppm	0.2019	0.2190	0.2772	0.2950	0.1940	0.1266	0.0804	0.0589	0.0480	0.0430
0.2 ppm / 3.0 ppm / 0.6 ppm	0.1970	0.2224	0.2762	0.2960	0.1941	0.1276	0.0810	0.0679	0.0479	0.0430
0.2 ppm / 3.0 ppm / 0.6 ppm	0.2030	0.2194	0.2752	0.2960	0.1940	0.1256	0.0893	0.0589	0.0469	0.0430
0.2 ppm / 3.0 ppm / 0.6 ppm	0.1989	0.2224	0.2730	0.2960	0.1920	0.1250	0.0890	0.0589	0.0490	0.0430
0.2 ppm / 3.0 ppm / 0.6 ppm	0.1990	0.2234	0.2742	0.2960	0.1990	0.1316	0.0810	0.0610	0.0499	0.0470
0.2 ppm / 3.0 ppm / 0.6 ppm	0.1989	0.2224	0.2762	0.2970	0.1940	0.1260	0.0820	0.0609	0.0480	0.0440
0.2 ppm / 3.0 ppm / 0.6 ppm	0.1990	0.2220	0.2830	0.2980	0.1981	0.1270	0.0873	0.0639	0.0489	0.0430
0.2 ppm / 3.0 ppm / 0.6 ppm	0.1989	0.2214	0.2770	0.2950	0.1911	0.1280	0.0830	0.0600	0.0480	0.0440
0.2 ppm / 3.0 ppm / 0.6 ppm	0.1960	0.2220	0.2760	0.2950	0.1921	0.1246	0.0814	0.0590	0.0480	0.0440
0.2 ppm / 3.0 ppm / 0.6 ppm	0.1970	0.2270	0.2772	0.2960	0.1931	0.1240	0.0840	0.0590	0.0489	0.0420
0.2 ppm / 3.0 ppm / 0.6 ppm	0.1969	0.2264	0.2760	0.2960	0.1980	0.1326	0.0833	0.0580	0.0569	0.0440
0.2 ppm / 3.0 ppm / 0.6 ppm	0.1969	0.2220	0.2762	0.2930	0.1941	0.1246	0.0814	0.0590	0.0470	0.0520
0.2 ppm / 3.0 ppm / 0.6 ppm	0.2020	0.2200	0.2750	0.2940	0.1931	0.1240	0.0830	0.0600	0.0479	0.0440
0.2 ppm / 3.0 ppm / 0.6 ppm	0.1990	0.2204	0.2772	0.2950	0.1960	0.1256	0.0814	0.0590	0.0520	0.0430
0.2 ppm / 3.0 ppm / 0.6 ppm	0.2029	0.2214	0.2780	0.3030	0.1941	0.1310	0.0833	0.0609	0.0479	0.0520
0.2 ppm / 3.0 ppm / 0.6 ppm	0.2030	0.2244	0.2780	0.2970	0.1940	0.1260	0.0824	0.0589	0.0490	0.0430
0.2 ppm / 3.0 ppm / 0.6 ppm	0.1990	0.2230	0.2813	0.2980	0.1910	0.1236	0.0833	0.0679	0.0490	0.0440
0.2 ppm / 3.0 ppm / 0.6 ppm	0.1979	0.2240	0.2750	0.3020	0.1971	0.1256	0.0870	0.0579	0.0519	0.0420
0.4 ppm / 5.0 ppm / 0.9 ppm	0.1960	0.2454	0.2960	0.3170	0.2132	0.1226	0.0836	0.0587	0.0479	0.0460
0.4 ppm / 5.0 ppm / 0.9 ppm	0.2166	0.2310	0.2750	0.2920	0.1913	0.1370	0.0920	0.0600	0.0490	0.0530
0.4 ppm / 5.0 ppm / 0.9 ppm	0.1996	0.2200	0.2704	0.3289	0.1923	0.1336	0.0820	0.0620	0.0489	0.0440
0.4 ppm / 5.0 ppm / 0.9 ppm	0.1876	0.2460	0.2954	0.3300	0.1980	0.1366	0.0926	0.0617	0.0470	0.0440
0.4 ppm / 5.0 ppm / 0.9 ppm	0.1860	0.2270	0.2860	0.3070	0.2032	0.1250	0.0870	0.0650	0.0489	0.0420

0.4 ppm / 5.0 ppm / 0.9 ppm	0.2200	0.2240	0.3064	0.2720	0.1960	0.1360	0.0826	0.0607	0.0510	0.0430
0.4 ppm / 5.0 ppm / 0.9 ppm	0.1970	0.2180	0.2714	0.2970	0.1930	0.1246	0.0840	0.0607	0.0480	0.0440
0.4 ppm / 5.0 ppm / 0.9 ppm	0.2170	0.2180	0.2780	0.2761	0.1953	0.1246	0.0940	0.0610	0.0510	0.0440
0.4 ppm / 5.0 ppm / 0.9 ppm	0.1966	0.2194	0.2540	0.2990	0.1810	0.1256	0.0820	0.0597	0.0509	0.0450
0.4 ppm / 5.0 ppm / 0.9 ppm	0.2020	0.2234	0.2760	0.2980	0.1910	0.1340	0.0826	0.0640	0.0549	0.0440
0.4 ppm / 5.0 ppm / 0.9 ppm	0.2080	0.2264	0.2794	0.2900	0.1983	0.1250	0.0846	0.0610	0.0589	0.0440
0.4 ppm / 5.0 ppm / 0.9 ppm	0.2016	0.2210	0.2790	0.2960	0.1943	0.1250	0.0820	0.0580	0.0509	0.0450
0.4 ppm / 5.0 ppm / 0.9 ppm	0.2086	0.2050	0.2575	0.3060	0.1910	0.1366	0.0816	0.0600	0.0469	0.0430
0.4 ppm / 5.0 ppm / 0.9 ppm	0.1960	0.2394	0.2720	0.2950	0.2120	0.1210	0.0866	0.0597	0.0580	0.0440
0.4 ppm / 5.0 ppm / 0.9 ppm	0.1956	0.2400	0.2744	0.2990	0.1930	0.1206	0.0936	0.0647	0.0490	0.0460
0.4 ppm / 5.0 ppm / 0.9 ppm	0.1956	0.2174	0.3080	0.2900	0.2040	0.1210	0.0840	0.0607	0.0499	0.0530
0.4 ppm / 5.0 ppm / 0.9 ppm	0.2056	0.2244	0.2784	0.3160	0.2120	0.1250	0.0826	0.0696	0.0490	0.0500
0.4 ppm / 5.0 ppm / 0.9 ppm	0.2060	0.2075	0.2710	0.2910	0.1903	0.1280	0.0830	0.0657	0.0489	0.0440
0.4 ppm / 5.0 ppm / 0.9 ppm	0.1980	0.2174	0.2774	0.2970	0.2122	0.1276	0.0836	0.0696	0.0500	0.0500
0.4 ppm / 5.0 ppm / 0.9 ppm	0.2196	0.2314	0.2864	0.2950	0.1833	0.1266	0.0830	0.0600	0.0550	0.0420
0.5 ppm / 7.0 ppm / 1.3 ppm	0.2027	0.2384	0.2802	0.2840	0.1930	0.1373	0.0800	0.0588	0.0476	0.0440
0.5 ppm / 7.0 ppm / 1.3 ppm	0.1827	0.2224	0.2742	0.3180	0.1960	0.1360	0.0830	0.0598	0.0580	0.0430
0.5 ppm / 7.0 ppm / 1.3 ppm	0.1977	0.2134	0.2732	0.2942	0.2030	0.1174	0.0810	0.0698	0.0506	0.0440
0.5 ppm / 7.0 ppm / 1.3 ppm	0.1927	0.2194	0.2822	0.2950	0.2053	0.1260	0.0820	0.0618	0.0480	0.0530
0.5 ppm / 7.0 ppm / 1.3 ppm	0.1830	0.2204	0.2503	0.2972	0.1933	0.1383	0.0927	0.0610	0.0556	0.0500
0.5 ppm / 7.0 ppm / 1.3 ppm	0.1980	0.2284	0.2740	0.2862	0.1930	0.1263	0.0937	0.0608	0.0486	0.0440
0.5 ppm / 7.0 ppm / 1.3 ppm	0.2067	0.2200	0.2872	0.2940	0.1933	0.1290	0.0930	0.0620	0.0500	0.0430
0.5 ppm / 7.0 ppm / 1.3 ppm	0.2010	0.2230	0.2663	0.3031	0.1774	0.1273	0.0838	0.0590	0.0490	0.0440
0.5 ppm / 7.0 ppm / 1.3 ppm	0.2150	0.2000	0.2860	0.2660	0.2050	0.1230	0.0800	0.0588	0.0580	0.0430
0.5 ppm / 7.0 ppm / 1.3 ppm	0.2030	0.2290	0.2770	0.3011	0.1784	0.1370	0.0930	0.0698	0.0490	0.0430
0.5 ppm / 7.0 ppm / 1.3 ppm	0.1920	0.2324	0.2960	0.3070	0.1983	0.1244	0.0850	0.0590	0.0486	0.0450
0.5 ppm / 7.0 ppm / 1.3 ppm	0.1807	0.2254	0.2480	0.2690	0.2103	0.1280	0.0927	0.0610	0.0560	0.0440
0.5 ppm / 7.0 ppm / 1.3 ppm	0.2096	0.2260	0.2473	0.3040	0.1770	0.1190	0.0850	0.0688	0.0500	0.0500
0.5 ppm / 7.0 ppm / 1.3 ppm	0.1977	0.1995	0.2952	0.2980	0.1780	0.1260	0.0848	0.0598	0.0496	0.0530
0.5 ppm / 7.0 ppm / 1.3 ppm	0.1810	0.2390	0.2510	0.2932	0.1884	0.1380	0.0840	0.0608	0.0496	0.0440
0.5 ppm / 7.0 ppm / 1.3 ppm	0.2146	0.2200	0.2830	0.3171	0.2100	0.1184	0.0838	0.0680	0.0510	0.0460
0.5 ppm / 7.0 ppm / 1.3 ppm	0.2070	0.2120	0.2640	0.3081	0.2013	0.1180	0.0828	0.0600	0.0480	0.0430
0.5 ppm / 7.0 ppm / 1.3 ppm	0.2090	0.2310	0.2750	0.2692	0.1880	0.1353	0.0808	0.0590	0.0480	0.0430
0.5 ppm / 7.0 ppm / 1.3 ppm	0.2007	0.2020	0.2772	0.2652	0.1990	0.1263	0.0848	0.0610	0.0486	0.0460
0.5 ppm / 7.0 ppm / 1.3 ppm	0.1980	0.2015	0.2820	0.3020	0.1943	0.1293	0.0930	0.0608	0.0496	0.0450

0.8 ppm / 10.0 ppm / 1.9 ppm	0.1920	0.2109	0.2700	0.2890	0.2146	0.1319	0.0890	0.0630	0.0545	0.0472
0.8 ppm / 10.0 ppm / 1.9 ppm	0.1970	0.2200	0.2761	0.2885	0.1890	0.1452	0.0860	0.0620	0.0524	0.0452
0.8 ppm / 10.0 ppm / 1.9 ppm	0.1965	0.2240	0.2761	0.2770	0.1921	0.1270	0.0860	0.0650	0.0640	0.0440
0.8 ppm / 10.0 ppm / 1.9 ppm	0.1950	0.2170	0.2650	0.2935	0.1920	0.1310	0.0901	0.0624	0.0510	0.0470
0.8 ppm / 10.0 ppm / 1.9 ppm	0.1904	0.2170	0.2771	0.3160	0.1880	0.1270	0.0860	0.0750	0.0680	0.0647
0.8 ppm / 10.0 ppm / 1.9 ppm	0.1965	0.2099	0.2710	0.3190	0.2130	0.1565	0.0850	0.0644	0.0500	0.0570
0.8 ppm / 10.0 ppm / 1.9 ppm	0.2189	0.2180	0.2730	0.2956	0.1962	0.1280	0.0850	0.0767	0.0648	0.0452
0.8 ppm / 10.0 ppm / 1.9 ppm	0.1990	0.2180	0.2780	0.2950	0.1972	0.1258	0.1014	0.0640	0.0504	0.0493
0.8 ppm / 10.0 ppm / 1.9 ppm	0.2030	0.2221	0.2950	0.2966	0.1962	0.1309	0.0891	0.0634	0.0514	0.0482
0.8 ppm / 10.0 ppm / 1.9 ppm	0.1970	0.2190	0.2598	0.2930	0.2260	0.1300	0.0871	0.0828	0.0545	0.0480
0.8 ppm / 10.0 ppm / 1.9 ppm	0.1900	0.2139	0.2750	0.2940	0.1940	0.1268	0.0881	0.0630	0.0530	0.0462
0.8 ppm / 10.0 ppm / 1.9 ppm	0.1920	0.2090	0.2741	0.2976	0.1870	0.1309	0.1060	0.0630	0.0699	0.0440
0.8 ppm / 10.0 ppm / 1.9 ppm	0.2016	0.2130	0.2985	0.2910	0.1940	0.1299	0.0881	0.0620	0.0524	0.0630
0.8 ppm / 10.0 ppm / 1.9 ppm	0.2006	0.2221	0.2730	0.2793	0.1930	0.1299	0.0870	0.0644	0.0494	0.0441
0.8 ppm / 10.0 ppm / 1.9 ppm	0.1985	0.2110	0.2700	0.2895	0.1972	0.1300	0.0850	0.0644	0.0510	0.0585
0.8 ppm / 10.0 ppm / 1.9 ppm	0.2170	0.2160	0.2669	0.2830	0.1931	0.1289	0.0850	0.0655	0.0514	0.0462
0.8 ppm / 10.0 ppm / 1.9 ppm	0.1914	0.2210	0.2690	0.2783	0.1982	0.1270	0.1086	0.0624	0.0510	0.0440
0.8 ppm / 10.0 ppm / 1.9 ppm	0.1996	0.2231	0.2630	0.2850	0.1980	0.1430	0.0880	0.0665	0.0530	0.0450
0.8 ppm / 10.0 ppm / 1.9 ppm	0.1960	0.2425	0.2608	0.2905	0.1940	0.1530	0.1000	0.0614	0.0500	0.0441
0.8 ppm / 10.0 ppm / 1.9 ppm	0.1945	0.2400	0.2580	0.2990	0.1970	0.1258	0.0860	0.0810	0.0514	0.0450
1.1 ppm / 15.0 ppm / 2.8 ppm	0.1980	0.2221	0.2193	0.2880	0.1960	0.1404	0.0884	0.0640	0.0516	0.0460
1.1 ppm / 15.0 ppm / 2.8 ppm	0.1950	0.2191	0.2724	0.2440	0.1601	0.1325	0.0954	0.0640	0.0510	0.0550
1.1 ppm / 15.0 ppm / 2.8 ppm	0.2110	0.2201	0.2754	0.2949	0.1961	0.1295	0.0950	0.0646	0.0546	0.0556
1.1 ppm / 15.0 ppm / 2.8 ppm	0.1982	0.2201	0.2754	0.2959	0.1990	0.1410	0.0880	0.0740	0.0516	0.0457
1.1 ppm / 15.0 ppm / 2.8 ppm	0.1992	0.2210	0.2770	0.2357	0.1930	0.1300	0.0775	0.0726	0.0510	0.0447
1.1 ppm / 15.0 ppm / 2.8 ppm	0.1962	0.2220	0.2280	0.2940	0.2001	0.1310	0.0780	0.0636	0.0536	0.0537
1.1 ppm / 15.0 ppm / 2.8 ppm	0.2022	0.2250	0.2754	0.2929	0.1971	0.1354	0.0974	0.0720	0.0520	0.0490
1.1 ppm / 15.0 ppm / 2.8 ppm	0.2092	0.2201	0.2880	0.2950	0.1990	0.1340	0.0880	0.0690	0.0615	0.0450
1.1 ppm / 15.0 ppm / 2.8 ppm	0.2012	0.2190	0.2750	0.2970	0.1650	0.1305	0.0890	0.0660	0.0610	0.0487
1.1 ppm / 15.0 ppm / 2.8 ppm	0.2040	0.2220	0.2760	0.2940	0.1971	0.1305	0.0864	0.0627	0.0520	0.0467
1.1 ppm / 15.0 ppm / 2.8 ppm	0.1680	0.2330	0.2750	0.2889	0.1951	0.1305	0.0870	0.0656	0.0506	0.0457
1.1 ppm / 15.0 ppm / 2.8 ppm	0.1972	0.1781	0.2790	0.3090	0.1981	0.1290	0.0904	0.0736	0.0490	0.0510
1.1 ppm / 15.0 ppm / 2.8 ppm	0.1990	0.2221	0.2730	0.2959	0.2010	0.1295	0.0884	0.0630	0.0570	0.0447
1.1 ppm / 15.0 ppm / 2.8 ppm	0.2002	0.1850	0.2744	0.3059	0.2000	0.1340	0.0930	0.0670	0.0566	0.0450
1.1 ppm / 15.0 ppm / 2.8 ppm	0.1930	0.2301	0.2754	0.2959	0.2080	0.1270	0.0980	0.0646	0.0605	0.0507

1.1 ppm / 15.0 ppm / 2.8 ppm	0.1992	0.2160	0.2630	0.2949	0.2071	0.1360	0.0860	0.0587	0.0600	0.0440
1.1 ppm / 15.0 ppm / 2.8 ppm	0.2010	0.2161	0.2855	0.2970	0.1951	0.1344	0.0874	0.0696	0.0496	0.0540
1.1 ppm / 15.0 ppm / 2.8 ppm	0.2000	0.2120	0.2694	0.2830	0.1910	0.1310	0.0924	0.0676	0.0540	0.0447
1.1 ppm / 15.0 ppm / 2.8 ppm	0.2020	0.2231	0.2680	0.2959	0.1990	0.1120	0.0874	0.0650	0.0516	0.0460
1.1 ppm / 15.0 ppm / 2.8 ppm	0.1632	0.2230	0.2744	0.3000	0.2001	0.1095	0.0910	0.0590	0.0550	0.0470
1.5 ppm / 20.0 ppm / 3.7 ppm	0.1960	0.2160	0.2656	0.2883	0.1906	0.1330	0.0920	0.0620	0.0500	0.0450
1.5 ppm / 20.0 ppm / 3.7 ppm	0.1960	0.2128	0.2686	0.2850	0.1960	0.1351	0.0880	0.0640	0.0542	0.0440
1.5 ppm / 20.0 ppm / 3.7 ppm	0.1934	0.2130	0.2715	0.2844	0.1920	0.1290	0.0923	0.0692	0.0550	0.0440
1.5 ppm / 20.0 ppm / 3.7 ppm	0.1983	0.2138	0.2680	0.2982	0.1975	0.1350	0.0860	0.0670	0.0502	0.0450
1.5 ppm / 20.0 ppm / 3.7 ppm	0.1910	0.2108	0.2735	0.2950	0.1970	0.1282	0.0862	0.0680	0.0510	0.0490
1.5 ppm / 20.0 ppm / 3.7 ppm	0.1990	0.2187	0.2656	0.2923	0.1880	0.1262	0.0860	0.0622	0.0500	0.0470
1.5 ppm / 20.0 ppm / 3.7 ppm	0.1910	0.2177	0.2580	0.2890	0.1926	0.1292	0.0872	0.0630	0.0512	0.0450
1.5 ppm / 20.0 ppm / 3.7 ppm	0.1900	0.2110	0.2660	0.2830	0.1956	0.1302	0.0920	0.0682	0.0520	0.0430
1.5 ppm / 20.0 ppm / 3.7 ppm	0.1983	0.2157	0.2666	0.2890	0.1966	0.1280	0.0880	0.0682	0.0570	0.0430
1.5 ppm / 20.0 ppm / 3.7 ppm	0.2020	0.2230	0.2676	0.2863	0.2010	0.1332	0.0930	0.0642	0.0510	0.0450
1.5 ppm / 20.0 ppm / 3.7 ppm	0.1924	0.2160	0.2620	0.2942	0.1926	0.1270	0.0872	0.0630	0.0502	0.0440
1.5 ppm / 20.0 ppm / 3.7 ppm	0.1914	0.2110	0.2740	0.2840	0.1920	0.1332	0.0862	0.0632	0.0540	0.0500
1.5 ppm / 20.0 ppm / 3.7 ppm	0.1970	0.2128	0.2640	0.2883	0.1920	0.1272	0.0882	0.0622	0.0520	0.0440
1.5 ppm / 20.0 ppm / 3.7 ppm	0.1983	0.2128	0.2646	0.2860	0.1936	0.1290	0.0882	0.0632	0.0562	0.0450
1.5 ppm / 20.0 ppm / 3.7 ppm	0.1920	0.2160	0.2640	0.2870	0.1920	0.1330	0.0923	0.0690	0.0552	0.0430
1.5 ppm / 20.0 ppm / 3.7 ppm	0.1934	0.2200	0.2636	0.2844	0.1960	0.1282	0.0870	0.0650	0.0500	0.0430
1.5 ppm / 20.0 ppm / 3.7 ppm	0.1920	0.2128	0.2646	0.2873	0.1966	0.1290	0.0870	0.0632	0.0512	0.0490
1.5 ppm / 20.0 ppm / 3.7 ppm	0.1914	0.2197	0.2690	0.2844	0.1950	0.1292	0.0862	0.0642	0.0522	0.0480
1.5 ppm / 20.0 ppm / 3.7 ppm	0.1934	0.2120	0.2774	0.2854	0.1946	0.1270	0.0870	0.0620	0.0522	0.0470
1.5 ppm / 20.0 ppm / 3.7 ppm	0.1963	0.2080	0.2670	0.2780	0.1916	0.1322	0.0923	0.0640	0.0502	0.0450
1.9 ppm / 25.0 ppm / 4.6 ppm	0.1921	0.2146	0.2686	0.2827	0.1935	0.1407	0.0920	0.0743	0.0550	0.0500
1.9 ppm / 25.0 ppm / 4.6 ppm	0.1921	0.2140	0.2750	0.2880	0.1960	0.1420	0.0990	0.0682	0.0529	0.0520
1.9 ppm / 25.0 ppm / 4.6 ppm	0.1930	0.2270	0.2627	0.2910	0.1935	0.1347	0.0882	0.0660	0.0529	0.0460
1.9 ppm / 25.0 ppm / 4.6 ppm	0.2080	0.2116	0.2636	0.3005	0.1945	0.1340	0.0880	0.0672	0.0570	0.0500
1.9 ppm / 25.0 ppm / 4.6 ppm	0.2099	0.2146	0.2630	0.2850	0.2083	0.1260	0.0932	0.0702	0.0569	0.0460
1.9 ppm / 25.0 ppm / 4.6 ppm	0.1890	0.2170	0.2650	0.2846	0.1964	0.1337	0.0910	0.0710	0.0540	0.0470
1.9 ppm / 25.0 ppm / 4.6 ppm	0.1940	0.2270	0.2646	0.2846	0.1970	0.1307	0.0932	0.0662	0.0540	0.0460
1.9 ppm / 25.0 ppm / 4.6 ppm	0.1960	0.2130	0.2660	0.2880	0.1964	0.1357	0.0910	0.0682	0.0549	0.0470
1.9 ppm / 25.0 ppm / 4.6 ppm	0.1940	0.2116	0.2666	0.2960	0.1970	0.1400	0.0920	0.0692	0.0539	0.0480
1.9 ppm / 25.0 ppm / 4.6 ppm	0.1930	0.2120	0.2640	0.2945	0.2100	0.1330	0.0962	0.0670	0.0600	0.0520

1.9 ppm / 25.0 ppm / 4.6 ppm	0.2010	0.2220	0.2636	0.2906	0.2034	0.1340	0.0912	0.0672	0.0530	0.0470
1.9 ppm / 25.0 ppm / 4.6 ppm	0.1940	0.2156	0.2745	0.2876	0.1960	0.1340	0.0930	0.0690	0.0550	0.0460
1.9 ppm / 25.0 ppm / 4.6 ppm	0.1930	0.2285	0.2780	0.2856	0.1910	0.1350	0.0960	0.0682	0.0549	0.0460
1.9 ppm / 25.0 ppm / 4.6 ppm	0.2100	0.2070	0.2760	0.2780	0.2040	0.1257	0.0992	0.0680	0.0529	0.0460
1.9 ppm / 25.0 ppm / 4.6 ppm	0.1950	0.2116	0.2700	0.2990	0.2090	0.1340	0.0902	0.0662	0.0539	0.0460
1.9 ppm / 25.0 ppm / 4.6 ppm	0.1970	0.2205	0.2735	0.2945	0.1960	0.1300	0.0922	0.0740	0.0530	0.0460
1.9 ppm / 25.0 ppm / 4.6 ppm	0.2079	0.2255	0.2794	0.2960	0.2103	0.1417	0.0930	0.0680	0.0599	0.0470
1.9 ppm / 25.0 ppm / 4.6 ppm	0.1950	0.2140	0.2670	0.2840	0.1974	0.1337	0.0952	0.0670	0.0549	0.0460
1.9 ppm / 25.0 ppm / 4.6 ppm	0.2000	0.2116	0.2636	0.2850	0.1974	0.1327	0.0950	0.0690	0.0530	0.0460
1.9 ppm / 25.0 ppm / 4.6 ppm	0.1960	0.2120	0.2570	0.2856	0.1960	0.1327	0.0922	0.0670	0.0540	0.0460
2.3ppm / 30.0 ppm / 5.6 ppm	0.2053	0.2240	0.2784	0.3020	0.2082	0.1400	0.0980	0.0727	0.0555	0.0480
2.3ppm / 30.0 ppm / 5.6 ppm	0.2033	0.2270	0.2770	0.3020	0.2092	0.1439	0.0967	0.0710	0.0585	0.0500
2.3ppm / 30.0 ppm / 5.6 ppm	0.2050	0.2248	0.2820	0.3029	0.2012	0.1409	0.0977	0.0700	0.0600	0.0478
2.3ppm / 30.0 ppm / 5.6 ppm	0.2030	0.2278	0.2834	0.2969	0.2092	0.1360	0.0987	0.0690	0.0555	0.0488
2.3ppm / 30.0 ppm / 5.6 ppm	0.1953	0.2220	0.2890	0.2960	0.2070	0.1419	0.0980	0.0688	0.0605	0.0478
2.3ppm / 30.0 ppm / 5.6 ppm	0.2033	0.2238	0.2730	0.3130	0.2000	0.1380	0.1007	0.0698	0.0585	0.0458
2.3ppm / 30.0 ppm / 5.6 ppm	0.2033	0.2280	0.2790	0.3019	0.2120	0.1420	0.0947	0.0700	0.0580	0.0468
2.3ppm / 30.0 ppm / 5.6 ppm	0.1940	0.2158	0.2830	0.3009	0.2070	0.1390	0.0947	0.0720	0.0565	0.0488
2.3ppm / 30.0 ppm / 5.6 ppm	0.2060	0.2228	0.2794	0.3039	0.2072	0.1429	0.0987	0.0710	0.0570	0.0480
2.3ppm / 30.0 ppm / 5.6 ppm	0.1983	0.2320	0.2814	0.3050	0.2022	0.1399	0.0977	0.0708	0.0570	0.0458
2.3ppm / 30.0 ppm / 5.6 ppm	0.2043	0.2270	0.2734	0.3019	0.2080	0.1430	0.0957	0.0718	0.0565	0.0500
2.3ppm / 30.0 ppm / 5.6 ppm	0.1980	0.2289	0.2804	0.3069	0.2082	0.1440	0.0970	0.0718	0.0540	0.0517
2.3ppm / 30.0 ppm / 5.6 ppm	0.2053	0.2268	0.2694	0.2900	0.2030	0.1420	0.0960	0.0750	0.0565	0.0460
2.3ppm / 30.0 ppm / 5.6 ppm	0.2010	0.2220	0.2804	0.3060	0.2050	0.1379	0.0980	0.0690	0.0560	0.0497
2.3ppm / 30.0 ppm / 5.6 ppm	0.2020	0.2140	0.2770	0.2990	0.2110	0.1419	0.1010	0.0720	0.0580	0.0490
2.3ppm / 30.0 ppm / 5.6 ppm	0.2073	0.2240	0.2670	0.2919	0.2060	0.1369	0.0990	0.0727	0.0545	0.0520
2.3ppm / 30.0 ppm / 5.6 ppm	0.2090	0.2258	0.2790	0.3039	0.2112	0.1389	0.0947	0.0718	0.0545	0.0460
2.3ppm / 30.0 ppm / 5.6 ppm	0.2030	0.2188	0.2844	0.3000	0.2062	0.1419	0.0987	0.0710	0.0550	0.0480
2.3ppm / 30.0 ppm / 5.6 ppm	0.2013	0.2190	0.2820	0.3060	0.2080	0.1420	0.0960	0.0747	0.0570	0.0470
2.3 ppm / 30.0 ppm / 5.6 ppm	0.2060	0.2248	0.2784	0.3089	0.2052	0.1410	0.0980	0.0730	0.0550	0.0507

Concentration Cu ²⁺ / Ni ²⁺ / Zn ²⁺	PR									
	430 nm	460 nm	490 nm	520 nm	550 nm	580 nm	610 nm	640 nm	670 nm	700 nm
0 ppm / 0 ppm / 0 ppm	0.1359	0.2047	0.3140	0.4050	0.3120	0.1658	0.0880	0.0610	0.0480	0.0508
0 ppm / 0 ppm / 0 ppm	0.1320	0.2157	0.3260	0.3930	0.3082	0.1630	0.0890	0.0600	0.0490	0.0440

0 ppm / 0 ppm / 0 ppm	0.1410	0.2060	0.3210	0.3940	0.3042	0.1688	0.0880	0.0670	0.0550	0.0430
0 ppm / 0 ppm / 0 ppm	0.1360	0.2047	0.3182	0.3950	0.3070	0.1710	0.0888	0.0598	0.0490	0.0430
0 ppm / 0 ppm / 0 ppm	0.1400	0.2050	0.3132	0.4070	0.3122	0.1610	0.0898	0.0598	0.0481	0.0428
0 ppm / 0 ppm / 0 ppm	0.1350	0.2100	0.3192	0.4070	0.3090	0.1660	0.0890	0.0680	0.0481	0.0508
0 ppm / 0 ppm / 0 ppm	0.1429	0.2090	0.3260	0.4030	0.3072	0.1728	0.0888	0.0610	0.0501	0.0510
0 ppm / 0 ppm / 0 ppm	0.1349	0.2067	0.3282	0.3990	0.3090	0.1608	0.0878	0.0600	0.0480	0.0438
0 ppm / 0 ppm / 0 ppm	0.1320	0.2070	0.3202	0.3990	0.3040	0.1660	0.0890	0.0600	0.0481	0.0428
0 ppm / 0 ppm / 0 ppm	0.1359	0.2100	0.3152	0.3980	0.3112	0.1670	0.0967	0.0598	0.0500	0.0420
0 ppm / 0 ppm / 0 ppm	0.1359	0.2167	0.3222	0.3980	0.3171	0.1668	0.0880	0.0678	0.0490	0.0430
0 ppm / 0 ppm / 0 ppm	0.1339	0.2080	0.3230	0.4090	0.3110	0.1628	0.0878	0.0610	0.0491	0.0440
0 ppm / 0 ppm / 0 ppm	0.1360	0.2050	0.3200	0.4000	0.3170	0.1690	0.0878	0.0600	0.0560	0.0430
0 ppm / 0 ppm / 0 ppm	0.1389	0.2160	0.3272	0.4050	0.3171	0.1640	0.0890	0.0598	0.0500	0.0490
0 ppm / 0 ppm / 0 ppm	0.1339	0.2140	0.3180	0.3950	0.3050	0.1638	0.0950	0.0598	0.0491	0.0440
0 ppm / 0 ppm / 0 ppm	0.1360	0.2097	0.3222	0.4080	0.3150	0.1670	0.0878	0.0600	0.0491	0.0418
0 ppm / 0 ppm / 0 ppm	0.1339	0.2097	0.3190	0.4030	0.3120	0.1640	0.0947	0.0608	0.0561	0.0428
0 ppm / 0 ppm / 0 ppm	0.1340	0.2087	0.3230	0.4050	0.3092	0.1658	0.0880	0.0608	0.0501	0.0438
0 ppm / 0 ppm / 0 ppm	0.1340	0.2057	0.3192	0.4050	0.3112	0.1658	0.0888	0.0678	0.0561	0.0428
0 ppm / 0 ppm / 0 ppm	0.1340	0.2077	0.3150	0.4000	0.3042	0.1638	0.0950	0.0618	0.0500	0.0438
0.1 ppm / 1.0 ppm / 0.2 ppm	0.1327	0.2020	0.3154	0.3890	0.3063	0.1660	0.0892	0.0662	0.0500	0.0440
0.1 ppm / 1.0 ppm / 0.2 ppm	0.1287	0.2025	0.3080	0.3914	0.3103	0.1700	0.0912	0.0630	0.0480	0.0500
0.1 ppm / 1.0 ppm / 0.2 ppm	0.1290	0.2030	0.3090	0.3844	0.2990	0.1642	0.0910	0.0602	0.0500	0.0440
0.1 ppm / 1.0 ppm / 0.2 ppm	0.1320	0.2015	0.3064	0.3930	0.2980	0.1703	0.0932	0.0680	0.0560	0.0440
0.1 ppm / 1.0 ppm / 0.2 ppm	0.1290	0.2055	0.3070	0.4000	0.3050	0.1660	0.0900	0.0610	0.0500	0.0480
0.1 ppm / 1.0 ppm / 0.2 ppm	0.1340	0.2045	0.3124	0.3934	0.3040	0.1670	0.0902	0.0682	0.0520	0.0510
0.1 ppm / 1.0 ppm / 0.2 ppm	0.1317	0.2025	0.3040	0.3914	0.3080	0.1720	0.0932	0.0670	0.0570	0.0450
0.1 ppm / 1.0 ppm / 0.2 ppm	0.1377	0.2010	0.3180	0.3904	0.3130	0.1662	0.0960	0.0650	0.0540	0.0460
0.1 ppm / 1.0 ppm / 0.2 ppm	0.1310	0.2010	0.2994	0.3940	0.3073	0.1660	0.0910	0.0650	0.0500	0.0420
0.1 ppm / 1.0 ppm / 0.2 ppm	0.1337	0.1945	0.3010	0.3870	0.3073	0.1700	0.0960	0.0620	0.0540	0.0440
0.1 ppm / 1.0 ppm / 0.2 ppm	0.1360	0.2070	0.3124	0.3864	0.3063	0.1700	0.0902	0.0612	0.0570	0.0460
0.1 ppm / 1.0 ppm / 0.2 ppm	0.1367	0.2020	0.3044	0.3860	0.3053	0.1662	0.0900	0.0632	0.0520	0.0480
0.1 ppm / 1.0 ppm / 0.2 ppm	0.1320	0.1975	0.3104	0.3934	0.2973	0.1672	0.0902	0.0622	0.0560	0.0500
0.1 ppm / 1.0 ppm / 0.2 ppm	0.1277	0.2010	0.3104	0.3964	0.3050	0.1683	0.0980	0.0652	0.0500	0.0440
0.1 ppm / 1.0 ppm / 0.2 ppm	0.1340	0.2005	0.3120	0.3900	0.3070	0.1672	0.0912	0.0700	0.0490	0.0440
0.1 ppm / 1.0 ppm / 0.2 ppm	0.1327	0.2015	0.3100	0.3900	0.3030	0.1723	0.0962	0.0620	0.0520	0.0450
0.1 ppm / 1.0 ppm / 0.2 ppm	0.1370	0.2000	0.3120	0.3794	0.3063	0.1630	0.0900	0.0620	0.0500	0.0500

0.1 ppm / 1.0 ppm / 0.2 ppm	0.1347	0.2015	0.3094	0.3914	0.3040	0.1703	0.0952	0.0642	0.0500	0.0460
0.1 ppm / 1.0 ppm / 0.2 ppm	0.1330	0.1970	0.3114	0.3810	0.3003	0.1632	0.0930	0.0632	0.0510	0.0450
0.1 ppm / 1.0 ppm / 0.2 ppm	0.1327	0.1960	0.3080	0.3840	0.3033	0.1630	0.0940	0.0612	0.0500	0.0420
0.2 ppm / 3.0 ppm / 0.6 ppm	0.1370	0.2120	0.3320	0.4180	0.3218	0.1766	0.0940	0.0650	0.0520	0.0470
0.2 ppm / 3.0 ppm / 0.6 ppm	0.1370	0.2150	0.3374	0.4220	0.3240	0.1740	0.0959	0.0640	0.0490	0.0458
0.2 ppm / 3.0 ppm / 0.6 ppm	0.1360	0.2160	0.3284	0.4160	0.3238	0.1700	0.0919	0.0620	0.0490	0.0440
0.2 ppm / 3.0 ppm / 0.6 ppm	0.1391	0.2174	0.3280	0.4190	0.3230	0.1730	0.0910	0.0610	0.0510	0.0430
0.2 ppm / 3.0 ppm / 0.6 ppm	0.1400	0.2134	0.3314	0.4190	0.3190	0.1736	0.0919	0.0660	0.0540	0.0430
0.2 ppm / 3.0 ppm / 0.6 ppm	0.1371	0.2140	0.3330	0.4190	0.3198	0.1720	0.0909	0.0659	0.0490	0.0430
0.2 ppm / 3.0 ppm / 0.6 ppm	0.1361	0.2140	0.3334	0.4190	0.3198	0.1716	0.0920	0.0610	0.0490	0.0450
0.2 ppm / 3.0 ppm / 0.6 ppm	0.1370	0.2110	0.3314	0.4130	0.3247	0.1760	0.0929	0.0610	0.0500	0.0438
0.2 ppm / 3.0 ppm / 0.6 ppm	0.1380	0.2150	0.3290	0.4150	0.3218	0.1736	0.0969	0.0649	0.0490	0.0440
0.2 ppm / 3.0 ppm / 0.6 ppm	0.1371	0.2130	0.3320	0.4160	0.3240	0.1696	0.0960	0.0669	0.0500	0.0448
0.2 ppm / 3.0 ppm / 0.6 ppm	0.1380	0.2140	0.3340	0.4170	0.3260	0.1706	0.0950	0.0629	0.0500	0.0428
0.2 ppm / 3.0 ppm / 0.6 ppm	0.1370	0.2144	0.3340	0.4170	0.3228	0.1710	0.0899	0.0609	0.0520	0.0428
0.2 ppm / 3.0 ppm / 0.6 ppm	0.1371	0.2134	0.3310	0.4170	0.3257	0.1736	0.0939	0.0630	0.0510	0.0438
0.2 ppm / 3.0 ppm / 0.6 ppm	0.1410	0.2144	0.3324	0.4170	0.3190	0.1706	0.0920	0.0619	0.0490	0.0460
0.2 ppm / 3.0 ppm / 0.6 ppm	0.1371	0.2160	0.3330	0.4170	0.3210	0.1760	0.0930	0.0630	0.0510	0.0460
0.2 ppm / 3.0 ppm / 0.6 ppm	0.1410	0.2144	0.3344	0.4130	0.3287	0.1730	0.0910	0.0650	0.0520	0.0460
0.2 ppm / 3.0 ppm / 0.6 ppm	0.1381	0.2134	0.3320	0.4120	0.3198	0.1720	0.0930	0.0609	0.0490	0.0428
0.2 ppm / 3.0 ppm / 0.6 ppm	0.1381	0.2114	0.3334	0.4240	0.3230	0.1700	0.0900	0.0609	0.0490	0.0468
0.2 ppm / 3.0 ppm / 0.6 ppm	0.1411	0.2114	0.3284	0.4170	0.3230	0.1716	0.0919	0.0639	0.0540	0.0468
0.2 ppm / 3.0 ppm / 0.6 ppm	0.1421	0.2184	0.3314	0.4170	0.3230	0.1776	0.0909	0.0619	0.0530	0.0458
0.4 ppm / 5.0 ppm / 0.9 ppm	0.1332	0.2020	0.3135	0.3923	0.3017	0.1638	0.0880	0.0618	0.0490	0.0420
0.4 ppm / 5.0 ppm / 0.9 ppm	0.1310	0.2060	0.3095	0.3930	0.3040	0.1657	0.0878	0.0610	0.0491	0.0430
0.4 ppm / 5.0 ppm / 0.9 ppm	0.1330	0.2055	0.3120	0.3972	0.3096	0.1650	0.0880	0.0610	0.0510	0.0460
0.4 ppm / 5.0 ppm / 0.9 ppm	0.1330	0.2055	0.3130	0.3900	0.3057	0.1648	0.0890	0.0618	0.0491	0.0430
0.4 ppm / 5.0 ppm / 0.9 ppm	0.1323	0.2035	0.3095	0.3920	0.2997	0.1640	0.0878	0.0618	0.0481	0.0430
0.4 ppm / 5.0 ppm / 0.9 ppm	0.1300	0.2020	0.3110	0.3982	0.3027	0.1630	0.0890	0.0620	0.0500	0.0430
0.4 ppm / 5.0 ppm / 0.9 ppm	0.1340	0.2015	0.3180	0.3890	0.3096	0.1640	0.0898	0.0600	0.0490	0.0430
0.4 ppm / 5.0 ppm / 0.9 ppm	0.1303	0.2025	0.3125	0.3970	0.3050	0.1628	0.0900	0.0610	0.0511	0.0430
0.4 ppm / 5.0 ppm / 0.9 ppm	0.1313	0.2020	0.3075	0.3893	0.3090	0.1640	0.0888	0.0608	0.0490	0.0430
0.4 ppm / 5.0 ppm / 0.9 ppm	0.1303	0.2015	0.3125	0.3980	0.3027	0.1650	0.0890	0.0608	0.0490	0.0430
0.4 ppm / 5.0 ppm / 0.9 ppm	0.1303	0.2000	0.3120	0.3853	0.3037	0.1638	0.0910	0.0600	0.0491	0.0430
0.4 ppm / 5.0 ppm / 0.9 ppm	0.1323	0.2025	0.3125	0.3923	0.3047	0.1638	0.0888	0.0620	0.0491	0.0430

0.4 ppm / 5.0 ppm / 0.9 ppm	0.1342	0.2020	0.3175	0.3923	0.3030	0.1670	0.0880	0.0610	0.0491	0.0430
0.4 ppm / 5.0 ppm / 0.9 ppm	0.1313	0.2015	0.3125	0.3910	0.3060	0.1670	0.0898	0.0610	0.0481	0.0440
0.4 ppm / 5.0 ppm / 0.9 ppm	0.1323	0.2010	0.3105	0.3930	0.3050	0.1630	0.0888	0.0598	0.0490	0.0430
0.4 ppm / 5.0 ppm / 0.9 ppm	0.1310	0.2030	0.3160	0.3940	0.3020	0.1628	0.0907	0.0608	0.0490	0.0430
0.4 ppm / 5.0 ppm / 0.9 ppm	0.1310	0.2060	0.3140	0.3923	0.3047	0.1630	0.0890	0.0628	0.0501	0.0430
0.4 ppm / 5.0 ppm / 0.9 ppm	0.1320	0.2025	0.3165	0.3913	0.3050	0.1677	0.0900	0.0630	0.0481	0.0440
0.4 ppm / 5.0 ppm / 0.9 ppm	0.1320	0.2030	0.3110	0.3883	0.3037	0.1667	0.0878	0.0618	0.0491	0.0460
0.4 ppm / 5.0 ppm / 0.9 ppm	0.1310	0.2005	0.3140	0.3883	0.3100	0.1638	0.0907	0.0600	0.0490	0.0420
0.5 ppm / 7.0 ppm / 1.3 ppm	0.1313	0.2020	0.3110	0.3886	0.3040	0.1660	0.0928	0.0598	0.0490	0.0430
0.5 ppm / 7.0 ppm / 1.3 ppm	0.1294	0.2000	0.3130	0.3910	0.3050	0.1658	0.0930	0.0608	0.0491	0.0440
0.5 ppm / 7.0 ppm / 1.3 ppm	0.1320	0.2050	0.3108	0.3900	0.3070	0.1648	0.0920	0.0618	0.0481	0.0458
0.5 ppm / 7.0 ppm / 1.3 ppm	0.1303	0.2035	0.3137	0.3936	0.3090	0.1648	0.0898	0.0628	0.0480	0.0428
0.5 ppm / 7.0 ppm / 1.3 ppm	0.1323	0.2025	0.3110	0.3960	0.3050	0.1648	0.0890	0.0620	0.0490	0.0438
0.5 ppm / 7.0 ppm / 1.3 ppm	0.1333	0.2030	0.3137	0.3900	0.3060	0.1688	0.0910	0.0650	0.0531	0.0430
0.5 ppm / 7.0 ppm / 1.3 ppm	0.1300	0.2020	0.3140	0.3906	0.3080	0.1668	0.0898	0.0630	0.0491	0.0440
0.5 ppm / 7.0 ppm / 1.3 ppm	0.1303	0.2005	0.3120	0.3936	0.3030	0.1680	0.0898	0.0628	0.0501	0.0410
0.5 ppm / 7.0 ppm / 1.3 ppm	0.1303	0.2045	0.3177	0.3876	0.3030	0.1650	0.0888	0.0600	0.0490	0.0438
0.5 ppm / 7.0 ppm / 1.3 ppm	0.1300	0.2000	0.3140	0.3946	0.3070	0.1650	0.0898	0.0608	0.0501	0.0408
0.5 ppm / 7.0 ppm / 1.3 ppm	0.1340	0.2040	0.3137	0.3920	0.3110	0.1650	0.0918	0.0618	0.0500	0.0438
0.5 ppm / 7.0 ppm / 1.3 ppm	0.1310	0.2010	0.3090	0.3940	0.3030	0.1660	0.0890	0.0620	0.0480	0.0460
0.5 ppm / 7.0 ppm / 1.3 ppm	0.1310	0.2005	0.3118	0.3936	0.3050	0.1668	0.0890	0.0600	0.0500	0.0410
0.5 ppm / 7.0 ppm / 1.3 ppm	0.1320	0.2030	0.3170	0.3906	0.3070	0.1658	0.0910	0.0610	0.0500	0.0430
0.5 ppm / 7.0 ppm / 1.3 ppm	0.1313	0.2035	0.3150	0.3970	0.3060	0.1660	0.0898	0.0618	0.0500	0.0408
0.5 ppm / 7.0 ppm / 1.3 ppm	0.1310	0.2015	0.3137	0.3960	0.3110	0.1668	0.0908	0.0610	0.0471	0.0438
0.5 ppm / 7.0 ppm / 1.3 ppm	0.1333	0.2000	0.3098	0.3940	0.3040	0.1660	0.0900	0.0620	0.0530	0.0438
0.5 ppm / 7.0 ppm / 1.3 ppm	0.1313	0.2015	0.3088	0.3966	0.3050	0.1658	0.0908	0.0630	0.0501	0.0440
0.5 ppm / 7.0 ppm / 1.3 ppm	0.1320	0.1995	0.3120	0.3920	0.3080	0.1660	0.0900	0.0618	0.0501	0.0440
0.5 ppm / 7.0 ppm / 1.3 ppm	0.1310	0.2015	0.3118	0.3906	0.3090	0.1690	0.0900	0.0648	0.0491	0.0428
0.8 ppm / 10.0 ppm / 1.9 ppm	0.1269	0.1847	0.2819	0.3730	0.2960	0.1640	0.0960	0.0659	0.0550	0.0480
0.8 ppm / 10.0 ppm / 1.9 ppm	0.1290	0.2010	0.2829	0.3640	0.2920	0.1667	0.0928	0.0650	0.0510	0.0470
0.8 ppm / 10.0 ppm / 1.9 ppm	0.1279	0.1860	0.3031	0.3682	0.2872	0.1717	0.0910	0.0669	0.0530	0.0429
0.8 ppm / 10.0 ppm / 1.9 ppm	0.1290	0.1948	0.3041	0.3812	0.2880	0.1710	0.0930	0.0640	0.0590	0.0448
0.8 ppm / 10.0 ppm / 1.9 ppm	0.1289	0.1917	0.2920	0.3541	0.2870	0.1608	0.0918	0.0659	0.0550	0.0460
0.8 ppm / 10.0 ppm / 1.9 ppm	0.1240	0.1900	0.3050	0.3550	0.2933	0.1600	0.0948	0.0620	0.0520	0.0478
0.8 ppm / 10.0 ppm / 1.9 ppm	0.1269	0.1897	0.2970	0.3812	0.2912	0.1638	0.0930	0.0619	0.0520	0.0448

0.8 ppm / 10.0 ppm / 1.9 ppm	0.1270	0.1907	0.3000	0.3702	0.2780	0.1697	0.0958	0.0680	0.0520	0.0520
0.8 ppm / 10.0 ppm / 1.9 ppm	0.1360	0.1978	0.3050	0.3772	0.2892	0.1687	0.1027	0.0720	0.0520	0.0458
0.8 ppm / 10.0 ppm / 1.9 ppm	0.1339	0.1917	0.2780	0.3690	0.3013	0.1620	0.0948	0.0719	0.0590	0.0478
0.8 ppm / 10.0 ppm / 1.9 ppm	0.1249	0.1980	0.2880	0.3551	0.3060	0.1690	0.1007	0.0649	0.0540	0.0468
0.8 ppm / 10.0 ppm / 1.9 ppm	0.1330	0.1988	0.2920	0.3810	0.2983	0.1630	0.0940	0.0660	0.0510	0.0439
0.8 ppm / 10.0 ppm / 1.9 ppm	0.1260	0.1840	0.2940	0.3610	0.3030	0.1610	0.0958	0.0669	0.0490	0.0470
0.8 ppm / 10.0 ppm / 1.9 ppm	0.1250	0.1880	0.3090	0.3670	0.2993	0.1628	0.0938	0.0649	0.0530	0.0450
0.8 ppm / 10.0 ppm / 1.9 ppm	0.1319	0.1940	0.2950	0.3752	0.2812	0.1720	0.0950	0.0639	0.0520	0.0458
0.8 ppm / 10.0 ppm / 1.9 ppm	0.1310	0.2010	0.3000	0.3611	0.2812	0.1640	0.0928	0.0670	0.0530	0.0460
0.8 ppm / 10.0 ppm / 1.9 ppm	0.1300	0.1978	0.2830	0.3480	0.2820	0.1638	0.1000	0.0660	0.0530	0.0518
0.8 ppm / 10.0 ppm / 1.9 ppm	0.1289	0.1867	0.2870	0.3672	0.3013	0.1608	0.0900	0.0650	0.0520	0.0450
0.8 ppm / 10.0 ppm / 1.9 ppm	0.1309	0.1910	0.2930	0.3830	0.2890	0.1670	0.0950	0.0670	0.0540	0.0440
0.8 ppm / 10.0 ppm / 1.9 ppm	0.1309	0.1910	0.2900	0.3873	0.3020	0.1648	0.0950	0.0679	0.0490	0.0430
1.1 ppm / 15.0 ppm / 2.8 ppm	0.1340	0.1880	0.2870	0.3740	0.2974	0.1660	0.0961	0.0666	0.0533	0.0470
1.1 ppm / 15.0 ppm / 2.8 ppm	0.1280	0.1975	0.2933	0.3620	0.2863	0.1737	0.0992	0.0676	0.0533	0.0482
1.1 ppm / 15.0 ppm / 2.8 ppm	0.1279	0.1865	0.2960	0.3527	0.2920	0.1680	0.0980	0.0720	0.0530	0.0472
1.1 ppm / 15.0 ppm / 2.8 ppm	0.1259	0.1930	0.2842	0.3668	0.3010	0.1687	0.0971	0.0690	0.0600	0.0480
1.1 ppm / 15.0 ppm / 2.8 ppm	0.1290	0.1880	0.3040	0.3640	0.2870	0.1656	0.1060	0.0676	0.0553	0.0540
1.1 ppm / 15.0 ppm / 2.8 ppm	0.1370	0.1865	0.3043	0.3698	0.2990	0.1697	0.1010	0.0686	0.0530	0.0520
1.1 ppm / 15.0 ppm / 2.8 ppm	0.1270	0.1915	0.2970	0.3708	0.3014	0.1740	0.0971	0.0740	0.0540	0.0462
1.1 ppm / 15.0 ppm / 2.8 ppm	0.1270	0.1945	0.2933	0.3587	0.2883	0.1680	0.0970	0.0680	0.0543	0.0460
1.1 ppm / 15.0 ppm / 2.8 ppm	0.1279	0.1880	0.2870	0.3668	0.2843	0.1707	0.0970	0.0747	0.0550	0.0533
1.1 ppm / 15.0 ppm / 2.8 ppm	0.1350	0.1845	0.2910	0.3620	0.2964	0.1690	0.1002	0.0740	0.0533	0.0462
1.1 ppm / 15.0 ppm / 2.8 ppm	0.1309	0.1880	0.2973	0.3550	0.2960	0.1750	0.0970	0.0666	0.0540	0.0470
1.1 ppm / 15.0 ppm / 2.8 ppm	0.1260	0.1985	0.2943	0.3718	0.2900	0.1666	0.1012	0.0727	0.0604	0.0523
1.1 ppm / 15.0 ppm / 2.8 ppm	0.1280	0.1950	0.2820	0.3810	0.2944	0.1616	0.1000	0.0666	0.0523	0.0462
1.1 ppm / 15.0 ppm / 2.8 ppm	0.1279	0.1925	0.2923	0.3390	0.2964	0.1670	0.1030	0.0680	0.0583	0.0460
1.1 ppm / 15.0 ppm / 2.8 ppm	0.1290	0.1955	0.2870	0.3750	0.2900	0.1737	0.0971	0.0686	0.0550	0.0503
1.1 ppm / 15.0 ppm / 2.8 ppm	0.1289	0.1965	0.2802	0.3768	0.3004	0.1757	0.1062	0.0670	0.0610	0.0452
1.1 ppm / 15.0 ppm / 2.8 ppm	0.1249	0.1930	0.2812	0.3640	0.3070	0.1730	0.0970	0.0737	0.0533	0.0462
1.1 ppm / 15.0 ppm / 2.8 ppm	0.1260	0.1815	0.2890	0.3527	0.2890	0.1666	0.0971	0.0660	0.0614	0.0450
1.1 ppm / 15.0 ppm / 2.8 ppm	0.1289	0.1890	0.2983	0.3710	0.2990	0.1610	0.1000	0.0670	0.0580	0.0460
1.1 ppm / 15.0 ppm / 2.8 ppm	0.1360	0.1980	0.2960	0.3610	0.3075	0.1700	0.1032	0.0680	0.0530	0.0510
1.5 ppm / 20.0 ppm / 3.7 ppm	0.1317	0.2032	0.3150	0.3842	0.3182	0.1795	0.1011	0.0690	0.0532	0.0450
1.5 ppm / 20.0 ppm / 3.7 ppm	0.1310	0.2040	0.3120	0.3970	0.3111	0.1770	0.1011	0.0685	0.0540	0.0450

1.5 ppm / 20.0 ppm / 3.7 ppm	0.1317	0.2062	0.3200	0.3972	0.3150	0.1785	0.1001	0.0670	0.0560	0.0490
1.5 ppm / 20.0 ppm / 3.7 ppm	0.1337	0.2030	0.3100	0.3870	0.3160	0.1780	0.0980	0.0675	0.0552	0.0460
1.5 ppm / 20.0 ppm / 3.7 ppm	0.1370	0.2040	0.3210	0.3920	0.3162	0.1785	0.1021	0.0675	0.0522	0.0470
1.5 ppm / 20.0 ppm / 3.7 ppm	0.1317	0.2040	0.3160	0.3890	0.3200	0.1780	0.1010	0.0695	0.0552	0.0470
1.5 ppm / 20.0 ppm / 3.7 ppm	0.1348	0.2002	0.3120	0.3982	0.3110	0.1805	0.1001	0.0705	0.0550	0.0470
1.5 ppm / 20.0 ppm / 3.7 ppm	0.1330	0.2020	0.3190	0.3942	0.3091	0.1780	0.1011	0.0695	0.0540	0.0470
1.5 ppm / 20.0 ppm / 3.7 ppm	0.1337	0.2072	0.3200	0.4032	0.3172	0.1780	0.1020	0.0690	0.0552	0.0450
1.5 ppm / 20.0 ppm / 3.7 ppm	0.1340	0.2082	0.3140	0.4012	0.3170	0.1765	0.1021	0.0700	0.0552	0.0450
1.5 ppm / 20.0 ppm / 3.7 ppm	0.1380	0.2050	0.3160	0.3960	0.3120	0.1780	0.0980	0.0685	0.0563	0.0460
1.5 ppm / 20.0 ppm / 3.7 ppm	0.1320	0.2090	0.3100	0.3872	0.3091	0.1785	0.0990	0.0700	0.0540	0.0490
1.5 ppm / 20.0 ppm / 3.7 ppm	0.1310	0.2062	0.3180	0.3902	0.3121	0.1765	0.1000	0.0680	0.0530	0.0470
1.5 ppm / 20.0 ppm / 3.7 ppm	0.1327	0.2030	0.3100	0.3970	0.3142	0.1800	0.1020	0.0690	0.0550	0.0470
1.5 ppm / 20.0 ppm / 3.7 ppm	0.1320	0.2042	0.3090	0.4030	0.3202	0.1795	0.1010	0.0690	0.0532	0.0470
1.5 ppm / 20.0 ppm / 3.7 ppm	0.1348	0.2060	0.3120	0.4012	0.3182	0.1780	0.1010	0.0710	0.0570	0.0460
1.5 ppm / 20.0 ppm / 3.7 ppm	0.1358	0.2022	0.3220	0.3950	0.3140	0.1785	0.1020	0.0705	0.0563	0.0460
1.5 ppm / 20.0 ppm / 3.7 ppm	0.1350	0.2032	0.3160	0.3910	0.3120	0.1770	0.0991	0.0705	0.0550	0.0440
1.5 ppm / 20.0 ppm / 3.7 ppm	0.1348	0.2012	0.3070	0.4000	0.3120	0.1775	0.1021	0.0710	0.0520	0.0470
1.5 ppm / 20.0 ppm / 3.7 ppm	0.1330	0.2010	0.3160	0.3912	0.3150	0.1810	0.1010	0.0715	0.0532	0.0440
1.9 ppm / 25.0 ppm / 4.6 ppm	0.1300	0.2050	0.3160	0.3810	0.3166	0.1830	0.1043	0.0750	0.0580	0.0469
1.9 ppm / 25.0 ppm / 4.6 ppm	0.1339	0.2100	0.3050	0.3984	0.3146	0.1800	0.1060	0.0737	0.0600	0.0470
1.9 ppm / 25.0 ppm / 4.6 ppm	0.1359	0.2090	0.3140	0.3964	0.3160	0.1810	0.1040	0.0698	0.0590	0.0459
1.9 ppm / 25.0 ppm / 4.6 ppm	0.1380	0.2043	0.3230	0.4030	0.3070	0.1800	0.1003	0.0740	0.0550	0.0480
1.9 ppm / 25.0 ppm / 4.6 ppm	0.1409	0.2000	0.3190	0.4050	0.3146	0.1820	0.1110	0.0700	0.0580	0.0479
1.9 ppm / 25.0 ppm / 4.6 ppm	0.1350	0.2060	0.3210	0.4004	0.3200	0.1830	0.1040	0.0720	0.0560	0.0510
1.9 ppm / 25.0 ppm / 4.6 ppm	0.1319	0.2053	0.3160	0.3894	0.3156	0.1800	0.1080	0.0710	0.0590	0.0490
1.9 ppm / 25.0 ppm / 4.6 ppm	0.1320	0.2060	0.3160	0.3914	0.3140	0.1800	0.1000	0.0710	0.0570	0.0460
1.9 ppm / 25.0 ppm / 4.6 ppm	0.1339	0.2023	0.3240	0.3944	0.3127	0.1770	0.1052	0.0728	0.0570	0.0469
1.9 ppm / 25.0 ppm / 4.6 ppm	0.1370	0.2023	0.3130	0.3964	0.3117	0.1820	0.1020	0.0690	0.0590	0.0509
1.9 ppm / 25.0 ppm / 4.6 ppm	0.1370	0.2070	0.3190	0.3910	0.3140	0.1810	0.1043	0.0698	0.0560	0.0479
1.9 ppm / 25.0 ppm / 4.6 ppm	0.1340	0.2053	0.3200	0.3954	0.3176	0.1800	0.1062	0.0737	0.0550	0.0489
1.9 ppm / 25.0 ppm / 4.6 ppm	0.1340	0.2063	0.3180	0.4000	0.3196	0.1850	0.1060	0.0737	0.0570	0.0469
1.9 ppm / 25.0 ppm / 4.6 ppm	0.1329	0.2080	0.3190	0.4050	0.3156	0.1840	0.1040	0.0760	0.0560	0.0470
1.9 ppm / 25.0 ppm / 4.6 ppm	0.1349	0.2063	0.3150	0.3924	0.3097	0.1810	0.0990	0.0740	0.0540	0.0509
1.9 ppm / 25.0 ppm / 4.6 ppm	0.1329	0.2090	0.3140	0.4000	0.3140	0.1810	0.1033	0.0708	0.0550	0.0460
1.9 ppm / 25.0 ppm / 4.6 ppm	0.1309	0.2053	0.3100	0.3820	0.3190	0.1800	0.1082	0.0708	0.0560	0.0510

1.9 ppm / 25.0 ppm / 4.6 ppm	0.1350	0.1980	0.3160	0.3950	0.3210	0.1850	0.1060	0.0718	0.0560	0.0490
1.9 ppm / 25.0 ppm / 4.6 ppm	0.1339	0.2113	0.3210	0.3990	0.3210	0.1879	0.1023	0.0730	0.0560	0.0489
1.9 ppm / 25.0 ppm / 4.6 ppm	0.1320	0.2053	0.3040	0.4004	0.3070	0.1761	0.1052	0.0767	0.0600	0.0490
2.3ppm / 30.0 ppm / 5.6 ppm	0.1255	0.1910	0.3070	0.3708	0.2992	0.1762	0.1030	0.0760	0.0570	0.0500
2.3ppm / 30.0 ppm / 5.6 ppm	0.1315	0.1949	0.3051	0.3797	0.3032	0.1772	0.1040	0.0718	0.0600	0.0470
2.3ppm / 30.0 ppm / 5.6 ppm	0.1260	0.1920	0.2980	0.3720	0.3032	0.1820	0.1064	0.0708	0.0580	0.0480
2.3ppm / 30.0 ppm / 5.6 ppm	0.1260	0.2000	0.2910	0.3730	0.2960	0.1750	0.1074	0.0720	0.0590	0.0462
2.3ppm / 30.0 ppm / 5.6 ppm	0.1250	0.1999	0.2991	0.3850	0.3002	0.1760	0.1080	0.0759	0.0610	0.0490
2.3ppm / 30.0 ppm / 5.6 ppm	0.1270	0.1999	0.3001	0.3720	0.3052	0.1760	0.1080	0.0738	0.0554	0.0480
2.3ppm / 30.0 ppm / 5.6 ppm	0.1275	0.1970	0.2952	0.3780	0.3040	0.1782	0.1044	0.0720	0.0590	0.0500
2.3ppm / 30.0 ppm / 5.6 ppm	0.1265	0.1979	0.3020	0.3800	0.3060	0.1803	0.1064	0.0748	0.0594	0.0482
2.3ppm / 30.0 ppm / 5.6 ppm	0.1285	0.2000	0.2970	0.3670	0.3082	0.1760	0.1020	0.0738	0.0574	0.0513
2.3ppm / 30.0 ppm / 5.6 ppm	0.1325	0.1989	0.2960	0.3737	0.3060	0.1810	0.1044	0.0750	0.0550	0.0513
2.3ppm / 30.0 ppm / 5.6 ppm	0.1330	0.1959	0.3050	0.3820	0.3100	0.1752	0.1064	0.0769	0.0570	0.0510
2.3ppm / 30.0 ppm / 5.6 ppm	0.1315	0.1929	0.3020	0.3757	0.3030	0.1800	0.1080	0.0748	0.0584	0.0462
2.3ppm / 30.0 ppm / 5.6 ppm	0.1300	0.1919	0.3011	0.3830	0.3020	0.1800	0.1070	0.0750	0.0580	0.0472
2.3ppm / 30.0 ppm / 5.6 ppm	0.1325	0.1939	0.3020	0.3777	0.3042	0.1752	0.1085	0.0740	0.0550	0.0493
2.3ppm / 30.0 ppm / 5.6 ppm	0.1300	0.1980	0.3040	0.3787	0.3040	0.1762	0.1024	0.0770	0.0604	0.0510
2.3ppm / 30.0 ppm / 5.6 ppm	0.1290	0.1950	0.2870	0.3790	0.3002	0.1770	0.1060	0.0750	0.0584	0.0482
2.3ppm / 30.0 ppm / 5.6 ppm	0.1245	0.1890	0.2962	0.3718	0.3010	0.1790	0.1070	0.0700	0.0554	0.0503
2.3ppm / 30.0 ppm / 5.6 ppm	0.1320	0.1970	0.3021	0.3826	0.3082	0.1803	0.1054	0.0718	0.0594	0.0493
2.3ppm / 30.0 ppm / 5.6 ppm	0.1310	0.1970	0.2932	0.3698	0.2970	0.1760	0.1040	0.0738	0.0584	0.0472
2.3ppm / 30.0 ppm / 5.6 ppm	0.1255	0.1950	0.2982	0.3610	0.3080	0.1813	0.1044	0.0730	0.0564	0.0480

Concentration Cu ²⁺ / Ni ²⁺ / Zn ²⁺	BPR									
	400 nm	430 nm	460 nm	490 nm	520 nm	550 nm	610 nm	640 nm	670 nm	700 nm
0 ppm / 0 ppm / 0 ppm	0.1550	0.1220	0.2006	0.3170	0.4643	0.5014	0.1347	0.0810	0.0577	0.0479
0 ppm / 0 ppm / 0 ppm	0.1577	0.1280	0.1976	0.3079	0.4570	0.5014	0.1350	0.0780	0.0547	0.0460
0 ppm / 0 ppm / 0 ppm	0.1610	0.1208	0.1970	0.3090	0.4650	0.5010	0.1350	0.0740	0.0540	0.0529
0 ppm / 0 ppm / 0 ppm	0.1600	0.1208	0.1960	0.3140	0.4673	0.4994	0.1307	0.0760	0.0600	0.0479
0 ppm / 0 ppm / 0 ppm	0.1570	0.1188	0.1930	0.3160	0.4643	0.5000	0.1340	0.0779	0.0550	0.0480
0 ppm / 0 ppm / 0 ppm	0.1587	0.1218	0.2006	0.3080	0.4680	0.5080	0.1367	0.0819	0.0527	0.0469
0 ppm / 0 ppm / 0 ppm	0.1620	0.1238	0.1920	0.3149	0.4650	0.5090	0.1327	0.0760	0.0567	0.0530
0 ppm / 0 ppm / 0 ppm	0.1590	0.1228	0.1936	0.3149	0.4562	0.5130	0.1337	0.0750	0.0547	0.0450
0 ppm / 0 ppm / 0 ppm	0.1557	0.1190	0.1970	0.3090	0.4560	0.5030	0.1357	0.0750	0.0530	0.0479

0 ppm / 0 ppm / 0 ppm	0.1560	0.1240	0.1956	0.3180	0.4690	0.5074	0.1337	0.0770	0.0570	0.0460
0 ppm / 0 ppm / 0 ppm	0.1607	0.1278	0.2000	0.3169	0.4693	0.5074	0.1360	0.0759	0.0616	0.0529
0 ppm / 0 ppm / 0 ppm	0.1627	0.1210	0.1966	0.3139	0.4582	0.5104	0.1330	0.0749	0.0620	0.0520
0 ppm / 0 ppm / 0 ppm	0.1587	0.1270	0.1940	0.3159	0.4690	0.5134	0.1347	0.0790	0.0567	0.0449
0 ppm / 0 ppm / 0 ppm	0.1540	0.1208	0.1980	0.3149	0.4693	0.5114	0.1360	0.0779	0.0590	0.0459
0 ppm / 0 ppm / 0 ppm	0.1570	0.1240	0.1936	0.3150	0.4580	0.5124	0.1340	0.0739	0.0570	0.0480
0 ppm / 0 ppm / 0 ppm	0.1537	0.1210	0.2010	0.3089	0.4610	0.5120	0.1330	0.0729	0.0597	0.0499
0 ppm / 0 ppm / 0 ppm	0.1590	0.1238	0.1976	0.3160	0.4680	0.5110	0.1300	0.0779	0.0560	0.0439
0 ppm / 0 ppm / 0 ppm	0.1597	0.1200	0.1966	0.3160	0.4582	0.4990	0.1337	0.0730	0.0557	0.0450
0 ppm / 0 ppm / 0 ppm	0.1567	0.1230	0.1960	0.3179	0.4613	0.5024	0.1400	0.0749	0.0587	0.0500
0 ppm / 0 ppm / 0 ppm	0.1567	0.1278	0.1916	0.3099	0.4673	0.5130	0.1397	0.0759	0.0550	0.0480
0.1 ppm / 1.0 ppm / 0.2 ppm	0.1546	0.1128	0.1780	0.2898	0.4466	0.4843	0.1375	0.0800	0.0580	0.0511
0.1 ppm / 1.0 ppm / 0.2 ppm	0.1520	0.1118	0.1760	0.2900	0.4357	0.4980	0.1335	0.0820	0.0598	0.0481
0.1 ppm / 1.0 ppm / 0.2 ppm	0.1546	0.1140	0.1788	0.2888	0.4330	0.5012	0.1345	0.0760	0.0560	0.0481
0.1 ppm / 1.0 ppm / 0.2 ppm	0.1520	0.1148	0.1800	0.2900	0.4310	0.4940	0.1340	0.0780	0.0600	0.0480
0.1 ppm / 1.0 ppm / 0.2 ppm	0.1506	0.1140	0.1810	0.2908	0.4277	0.4952	0.1315	0.0820	0.0590	0.0471
0.1 ppm / 1.0 ppm / 0.2 ppm	0.1526	0.1148	0.1810	0.2998	0.4310	0.4900	0.1320	0.0770	0.0568	0.0480
0.1 ppm / 1.0 ppm / 0.2 ppm	0.1520	0.1210	0.1788	0.2820	0.4490	0.4830	0.1355	0.0800	0.0560	0.0460
0.1 ppm / 1.0 ppm / 0.2 ppm	0.1510	0.1150	0.1780	0.2938	0.4430	0.4880	0.1335	0.0760	0.0610	0.0471
0.1 ppm / 1.0 ppm / 0.2 ppm	0.1526	0.1148	0.1818	0.2910	0.4427	0.4810	0.1350	0.0780	0.0568	0.0461
0.1 ppm / 1.0 ppm / 0.2 ppm	0.1616	0.1148	0.1808	0.2930	0.4370	0.4883	0.1405	0.0780	0.0578	0.0501
0.1 ppm / 1.0 ppm / 0.2 ppm	0.1506	0.1150	0.1758	0.2878	0.4347	0.4863	0.1340	0.0800	0.0578	0.0481
0.1 ppm / 1.0 ppm / 0.2 ppm	0.1530	0.1158	0.1800	0.2860	0.4506	0.4773	0.1355	0.0770	0.0568	0.0470
0.1 ppm / 1.0 ppm / 0.2 ppm	0.1620	0.1128	0.1780	0.2878	0.4470	0.4843	0.1360	0.0780	0.0578	0.0481
0.1 ppm / 1.0 ppm / 0.2 ppm	0.1516	0.1217	0.1768	0.3000	0.4397	0.4880	0.1335	0.0780	0.0570	0.0490
0.1 ppm / 1.0 ppm / 0.2 ppm	0.1550	0.1140	0.1808	0.2908	0.4337	0.4912	0.1340	0.0780	0.0570	0.0480
0.1 ppm / 1.0 ppm / 0.2 ppm	0.1510	0.1120	0.1808	0.2860	0.4360	0.4810	0.1370	0.0780	0.0558	0.0480
0.1 ppm / 1.0 ppm / 0.2 ppm	0.1536	0.1130	0.1798	0.2920	0.4370	0.4982	0.1345	0.0780	0.0570	0.0510
0.1 ppm / 1.0 ppm / 0.2 ppm	0.1540	0.1160	0.1820	0.2860	0.4390	0.5000	0.1330	0.0770	0.0608	0.0470
0.1 ppm / 1.0 ppm / 0.2 ppm	0.1540	0.1138	0.1897	0.2838	0.4347	0.4843	0.1410	0.0770	0.0580	0.0501
0.1 ppm / 1.0 ppm / 0.2 ppm	0.1546	0.1130	0.1897	0.2828	0.4377	0.4860	0.1340	0.0800	0.0588	0.0510
0.2 ppm / 3.0 ppm / 0.6 ppm	0.1500	0.1130	0.1850	0.2898	0.4530	0.5050	0.1346	0.0790	0.0568	0.0529
0.2 ppm / 3.0 ppm / 0.6 ppm	0.1520	0.1145	0.1845	0.2960	0.4447	0.4965	0.1330	0.0820	0.0618	0.0469
0.2 ppm / 3.0 ppm / 0.6 ppm	0.1493	0.1165	0.1790	0.3067	0.4590	0.5084	0.1410	0.0760	0.0580	0.0490
0.2 ppm / 3.0 ppm / 0.6 ppm	0.1490	0.1215	0.1865	0.3020	0.4567	0.5044	0.1416	0.0790	0.0560	0.0500

0.2 ppm / 3.0 ppm / 0.6 ppm	0.1523	0.1195	0.1825	0.3017	0.4398	0.4880	0.1416	0.0780	0.0590	0.0480
0.2 ppm / 3.0 ppm / 0.6 ppm	0.1540	0.1245	0.1845	0.3080	0.4440	0.5050	0.1420	0.0800	0.0578	0.0479
0.2 ppm / 3.0 ppm / 0.6 ppm	0.1580	0.1175	0.1880	0.2940	0.4570	0.4965	0.1390	0.0820	0.0578	0.0480
0.2 ppm / 3.0 ppm / 0.6 ppm	0.1510	0.1175	0.1815	0.2920	0.4320	0.4960	0.1336	0.0770	0.0578	0.0519
0.2 ppm / 3.0 ppm / 0.6 ppm	0.1572	0.1210	0.1925	0.2957	0.4318	0.4950	0.1356	0.0780	0.0588	0.0470
0.2 ppm / 3.0 ppm / 0.6 ppm	0.1570	0.1125	0.1840	0.2960	0.4510	0.4970	0.1396	0.0820	0.0580	0.0499
0.2 ppm / 3.0 ppm / 0.6 ppm	0.1513	0.1170	0.1795	0.3007	0.4437	0.4836	0.1376	0.0830	0.0618	0.0530
0.2 ppm / 3.0 ppm / 0.6 ppm	0.1600	0.1190	0.1940	0.3040	0.4537	0.4885	0.1330	0.0800	0.0580	0.0499
0.2 ppm / 3.0 ppm / 0.6 ppm	0.1602	0.1150	0.1785	0.2957	0.4447	0.4830	0.1326	0.0790	0.0620	0.0489
0.2 ppm / 3.0 ppm / 0.6 ppm	0.1562	0.1250	0.1880	0.2918	0.4527	0.4975	0.1386	0.0830	0.0590	0.0490
0.2 ppm / 3.0 ppm / 0.6 ppm	0.1630	0.1140	0.1880	0.2957	0.4400	0.4920	0.1370	0.0780	0.0578	0.0500
0.2 ppm / 3.0 ppm / 0.6 ppm	0.1543	0.1135	0.1885	0.3010	0.4507	0.5110	0.1350	0.0760	0.0580	0.0479
0.2 ppm / 3.0 ppm / 0.6 ppm	0.1552	0.1170	0.1820	0.2878	0.4430	0.5100	0.1390	0.0780	0.0588	0.0520
0.2 ppm / 3.0 ppm / 0.6 ppm	0.1622	0.1190	0.1780	0.3017	0.4360	0.5054	0.1366	0.0790	0.0620	0.0510
0.2 ppm / 3.0 ppm / 0.6 ppm	0.1550	0.1145	0.1820	0.2880	0.4440	0.4915	0.1350	0.0770	0.0610	0.0519
0.2 ppm / 3.0 ppm / 0.6 ppm	0.1503	0.1130	0.1885	0.2890	0.4368	0.5064	0.1380	0.0830	0.0618	0.0489
0.4 ppm / 5.0 ppm / 0.9 ppm	0.1530	0.1128	0.1780	0.2860	0.4381	0.4904	0.1420	0.0820	0.0580	0.0498
0.4 ppm / 5.0 ppm / 0.9 ppm	0.1575	0.1128	0.1797	0.2910	0.4441	0.4924	0.1400	0.0800	0.0590	0.0488
0.4 ppm / 5.0 ppm / 0.9 ppm	0.1515	0.1187	0.1770	0.2860	0.4420	0.4970	0.1360	0.0790	0.0580	0.0478
0.4 ppm / 5.0 ppm / 0.9 ppm	0.1545	0.1167	0.1810	0.2920	0.4380	0.4840	0.1373	0.0820	0.0620	0.0510
0.4 ppm / 5.0 ppm / 0.9 ppm	0.1560	0.1167	0.1857	0.2910	0.4431	0.4960	0.1373	0.0847	0.0580	0.0517
0.4 ppm / 5.0 ppm / 0.9 ppm	0.1510	0.1128	0.1817	0.2870	0.4300	0.4950	0.1373	0.0800	0.0590	0.0500
0.4 ppm / 5.0 ppm / 0.9 ppm	0.1580	0.1138	0.1827	0.2970	0.4421	0.4820	0.1370	0.0798	0.0610	0.0480
0.4 ppm / 5.0 ppm / 0.9 ppm	0.1540	0.1150	0.1850	0.2890	0.4440	0.4910	0.1353	0.0788	0.0600	0.0507
0.4 ppm / 5.0 ppm / 0.9 ppm	0.1540	0.1138	0.1840	0.2950	0.4310	0.4855	0.1400	0.0790	0.0580	0.0468
0.4 ppm / 5.0 ppm / 0.9 ppm	0.1520	0.1150	0.1797	0.2960	0.4360	0.4890	0.1412	0.0817	0.0610	0.0500
0.4 ppm / 5.0 ppm / 0.9 ppm	0.1525	0.1148	0.1780	0.2950	0.4480	0.5020	0.1402	0.0798	0.0590	0.0478
0.4 ppm / 5.0 ppm / 0.9 ppm	0.1565	0.1158	0.1840	0.2920	0.4390	0.5000	0.1353	0.0780	0.0590	0.0470
0.4 ppm / 5.0 ppm / 0.9 ppm	0.1515	0.1140	0.1810	0.2960	0.4361	0.4904	0.1360	0.0817	0.0590	0.0480
0.4 ppm / 5.0 ppm / 0.9 ppm	0.1570	0.1170	0.1800	0.2890	0.4391	0.4984	0.1363	0.0830	0.0570	0.0470
0.4 ppm / 5.0 ppm / 0.9 ppm	0.1555	0.1130	0.1790	0.2970	0.4400	0.4930	0.1380	0.0790	0.0580	0.0488
0.4 ppm / 5.0 ppm / 0.9 ppm	0.1575	0.1177	0.1787	0.2950	0.4381	0.4920	0.1420	0.0837	0.0580	0.0480
0.4 ppm / 5.0 ppm / 0.9 ppm	0.1570	0.1140	0.1797	0.2950	0.4430	0.4840	0.1363	0.0778	0.0600	0.0510
0.4 ppm / 5.0 ppm / 0.9 ppm	0.1535	0.1170	0.1837	0.2860	0.4460	0.4894	0.1370	0.0778	0.0620	0.0498
0.4 ppm / 5.0 ppm / 0.9 ppm	0.1530	0.1180	0.1857	0.2920	0.4300	0.4964	0.1402	0.0788	0.0570	0.0478

0.4 ppm / 5.0 ppm / 0.9 ppm	0.1535	0.1130	0.1850	0.2910	0.4321	0.4954	0.1412	0.0798	0.0590	0.0490
0.5 ppm / 7.0 ppm / 1.3 ppm	0.1570	0.1138	0.1637	0.2750	0.3960	0.4550	0.1553	0.1020	0.0700	0.0580
0.5 ppm / 7.0 ppm / 1.3 ppm	0.1610	0.1150	0.1660	0.2548	0.4104	0.4410	0.1540	0.0977	0.0750	0.0590
0.5 ppm / 7.0 ppm / 1.3 ppm	0.1600	0.1100	0.1657	0.2764	0.4140	0.4559	0.1600	0.1010	0.0711	0.0590
0.5 ppm / 7.0 ppm / 1.3 ppm	0.1590	0.1120	0.1690	0.2710	0.4120	0.4590	0.1560	0.0967	0.0750	0.0598
0.5 ppm / 7.0 ppm / 1.3 ppm	0.1565	0.1138	0.1710	0.2620	0.4060	0.4538	0.1600	0.1026	0.0740	0.0549
0.5 ppm / 7.0 ppm / 1.3 ppm	0.1625	0.1060	0.1720	0.2713	0.4110	0.4600	0.1563	0.0977	0.0769	0.0579
0.5 ppm / 7.0 ppm / 1.3 ppm	0.1625	0.1130	0.1740	0.2672	0.4156	0.4630	0.1582	0.1020	0.0760	0.0600
0.5 ppm / 7.0 ppm / 1.3 ppm	0.1570	0.1067	0.1630	0.2692	0.4070	0.4630	0.1610	0.0960	0.0730	0.0588
0.5 ppm / 7.0 ppm / 1.3 ppm	0.1605	0.1138	0.1637	0.2760	0.4053	0.4467	0.1560	0.0980	0.0769	0.0560
0.5 ppm / 7.0 ppm / 1.3 ppm	0.1570	0.1110	0.1688	0.2710	0.3869	0.4540	0.1563	0.0980	0.0700	0.0610
0.5 ppm / 7.0 ppm / 1.3 ppm	0.1565	0.1077	0.1620	0.2744	0.3960	0.4650	0.1560	0.1010	0.0740	0.0618
0.5 ppm / 7.0 ppm / 1.3 ppm	0.1555	0.1138	0.1729	0.2785	0.4002	0.4477	0.1612	0.0960	0.0750	0.0620
0.5 ppm / 7.0 ppm / 1.3 ppm	0.1550	0.1090	0.1668	0.2661	0.4166	0.4416	0.1573	0.0997	0.0690	0.0588
0.5 ppm / 7.0 ppm / 1.3 ppm	0.1610	0.1140	0.1700	0.2764	0.3982	0.4620	0.1590	0.0997	0.0691	0.0550
0.5 ppm / 7.0 ppm / 1.3 ppm	0.1615	0.1098	0.1719	0.2750	0.4145	0.4480	0.1600	0.1026	0.0700	0.0569
0.5 ppm / 7.0 ppm / 1.3 ppm	0.1610	0.1060	0.1657	0.2661	0.4104	0.4579	0.1592	0.0970	0.0740	0.0618
0.5 ppm / 7.0 ppm / 1.3 ppm	0.1585	0.1098	0.1729	0.2690	0.4140	0.4335	0.1612	0.0997	0.0720	0.0620
0.5 ppm / 7.0 ppm / 1.3 ppm	0.1565	0.1057	0.1719	0.2641	0.4000	0.4589	0.1553	0.1036	0.0720	0.0560
0.5 ppm / 7.0 ppm / 1.3 ppm	0.1595	0.1128	0.1680	0.2660	0.3971	0.4430	0.1573	0.1016	0.0720	0.0598
0.5 ppm / 7.0 ppm / 1.3 ppm	0.1615	0.1070	0.1660	0.2640	0.4063	0.4609	0.1560	0.1006	0.0740	0.0569
0.8 ppm / 10.0 ppm / 1.9 ppm	0.1570	0.1095	0.1639	0.2690	0.4100	0.4540	0.1403	0.0890	0.0648	0.0530
0.8 ppm / 10.0 ppm / 1.9 ppm	0.1572	0.1100	0.1690	0.2700	0.4200	0.4491	0.1460	0.0870	0.0620	0.0520
0.8 ppm / 10.0 ppm / 1.9 ppm	0.1513	0.1115	0.1730	0.2670	0.3990	0.4570	0.1522	0.0890	0.0660	0.0508
0.8 ppm / 10.0 ppm / 1.9 ppm	0.1543	0.1075	0.1709	0.2691	0.4210	0.4690	0.1420	0.0868	0.0668	0.0518
0.8 ppm / 10.0 ppm / 1.9 ppm	0.1650	0.1105	0.1669	0.2640	0.4139	0.4719	0.1450	0.0878	0.0670	0.0508
0.8 ppm / 10.0 ppm / 1.9 ppm	0.1533	0.1155	0.1719	0.2831	0.4079	0.4560	0.1472	0.0828	0.0638	0.0550
0.8 ppm / 10.0 ppm / 1.9 ppm	0.1540	0.1100	0.1769	0.2721	0.4210	0.4550	0.1433	0.0887	0.0628	0.0540
0.8 ppm / 10.0 ppm / 1.9 ppm	0.1540	0.1080	0.1639	0.2771	0.4179	0.4520	0.1452	0.0858	0.0668	0.0508
0.8 ppm / 10.0 ppm / 1.9 ppm	0.1590	0.1100	0.1680	0.2710	0.4080	0.4629	0.1440	0.0858	0.0650	0.0538
0.8 ppm / 10.0 ppm / 1.9 ppm	0.1563	0.1095	0.1690	0.2711	0.4089	0.4540	0.1470	0.0890	0.0650	0.0510
0.8 ppm / 10.0 ppm / 1.9 ppm	0.1570	0.1100	0.1700	0.2671	0.4230	0.4680	0.1420	0.0860	0.0658	0.0538
0.8 ppm / 10.0 ppm / 1.9 ppm	0.1602	0.1110	0.1700	0.2791	0.4020	0.4490	0.1400	0.0900	0.0628	0.0510
0.8 ppm / 10.0 ppm / 1.9 ppm	0.1650	0.1080	0.1669	0.2740	0.4060	0.4610	0.1440	0.0897	0.0660	0.0500
0.8 ppm / 10.0 ppm / 1.9 ppm	0.1540	0.1095	0.1769	0.2741	0.4069	0.4550	0.1423	0.0890	0.0628	0.0518

0.8 ppm / 10.0 ppm / 1.9 ppm	0.1553	0.1105	0.1650	0.2661	0.4159	0.4629	0.1433	0.0860	0.0618	0.0500
0.8 ppm / 10.0 ppm / 1.9 ppm	0.1602	0.1150	0.1679	0.2830	0.4130	0.4659	0.1413	0.0907	0.0650	0.0548
0.8 ppm / 10.0 ppm / 1.9 ppm	0.1530	0.1065	0.1709	0.2730	0.4019	0.4450	0.1443	0.0850	0.0648	0.0528
0.8 ppm / 10.0 ppm / 1.9 ppm	0.1543	0.1070	0.1750	0.2810	0.4239	0.4491	0.1472	0.0950	0.0630	0.0508
0.8 ppm / 10.0 ppm / 1.9 ppm	0.1550	0.1085	0.1669	0.2621	0.4050	0.4710	0.1450	0.0848	0.0630	0.0520
0.8 ppm / 10.0 ppm / 1.9 ppm	0.1590	0.1100	0.1680	0.2780	0.4029	0.4690	0.1520	0.0887	0.0610	0.0540
1.1 ppm / 15.0 ppm / 2.8 ppm	0.1590	0.1088	0.1656	0.2670	0.3840	0.4449	0.1560	0.0920	0.0700	0.0539
1.1 ppm / 15.0 ppm / 2.8 ppm	0.1583	0.1150	0.1680	0.2637	0.4010	0.4430	0.1520	0.0880	0.0670	0.0520
1.1 ppm / 15.0 ppm / 2.8 ppm	0.1540	0.1120	0.1580	0.2620	0.3960	0.4590	0.1520	0.0930	0.0640	0.0540
1.1 ppm / 15.0 ppm / 2.8 ppm	0.1583	0.1138	0.1630	0.2680	0.4020	0.4530	0.1500	0.0910	0.0700	0.0549
1.1 ppm / 15.0 ppm / 2.8 ppm	0.1590	0.1070	0.1640	0.2587	0.3908	0.4370	0.1500	0.0910	0.0680	0.0550
1.1 ppm / 15.0 ppm / 2.8 ppm	0.1543	0.1108	0.1686	0.2620	0.4040	0.4450	0.1460	0.0940	0.0680	0.0570
1.1 ppm / 15.0 ppm / 2.8 ppm	0.1504	0.1068	0.1690	0.2657	0.4000	0.4370	0.1500	0.0930	0.0690	0.0519
1.1 ppm / 15.0 ppm / 2.8 ppm	0.1590	0.1100	0.1616	0.2597	0.4007	0.4498	0.1510	0.1000	0.0680	0.0540
1.1 ppm / 15.0 ppm / 2.8 ppm	0.1630	0.1098	0.1630	0.2640	0.3980	0.4420	0.1500	0.0940	0.0680	0.0559
1.1 ppm / 15.0 ppm / 2.8 ppm	0.1553	0.1050	0.1690	0.2587	0.3908	0.4460	0.1500	0.0940	0.0700	0.0520
1.1 ppm / 15.0 ppm / 2.8 ppm	0.1530	0.1060	0.1666	0.2640	0.4017	0.4598	0.1430	0.0930	0.0750	0.0550
1.1 ppm / 15.0 ppm / 2.8 ppm	0.1623	0.1088	0.1686	0.2737	0.3997	0.4429	0.1500	0.0900	0.0690	0.0519
1.1 ppm / 15.0 ppm / 2.8 ppm	0.1593	0.1058	0.1680	0.2667	0.4127	0.4449	0.1430	0.0940	0.0700	0.0539
1.1 ppm / 15.0 ppm / 2.8 ppm	0.1580	0.1110	0.1606	0.2627	0.3987	0.4490	0.1430	0.0930	0.0660	0.0549
1.1 ppm / 15.0 ppm / 2.8 ppm	0.1534	0.1068	0.1616	0.2720	0.3960	0.4290	0.1450	0.0920	0.0700	0.0560
1.1 ppm / 15.0 ppm / 2.8 ppm	0.1514	0.1058	0.1696	0.2667	0.4127	0.4480	0.1500	0.0940	0.0690	0.0560
1.1 ppm / 15.0 ppm / 2.8 ppm	0.1560	0.1108	0.1700	0.2540	0.3938	0.4419	0.1470	0.0940	0.0690	0.0559
1.1 ppm / 15.0 ppm / 2.8 ppm	0.1620	0.1060	0.1640	0.2737	0.4110	0.4598	0.1500	0.0950	0.0660	0.0540
1.1 ppm / 15.0 ppm / 2.8 ppm	0.1573	0.1090	0.1646	0.2700	0.3967	0.4459	0.1520	0.0930	0.0680	0.0569
1.1 ppm / 15.0 ppm / 2.8 ppm	0.1613	0.1100	0.1646	0.2690	0.4070	0.4500	0.1470	0.0940	0.0680	0.0549
1.5 ppm / 20.0 ppm / 3.7 ppm	0.1560	0.1160	0.1790	0.2816	0.4092	0.4600	0.1530	0.0932	0.0732	0.0590
1.5 ppm / 20.0 ppm / 3.7 ppm	0.1560	0.1050	0.1760	0.2650	0.4230	0.4530	0.1505	0.0990	0.0690	0.0563
1.5 ppm / 20.0 ppm / 3.7 ppm	0.1612	0.1130	0.1720	0.2840	0.4112	0.4500	0.1500	0.0942	0.0722	0.0560
1.5 ppm / 20.0 ppm / 3.7 ppm	0.1583	0.1080	0.1730	0.2816	0.4202	0.4700	0.1505	0.0942	0.0712	0.0553
1.5 ppm / 20.0 ppm / 3.7 ppm	0.1523	0.1110	0.1790	0.2760	0.4172	0.4690	0.1540	0.0902	0.0683	0.0543
1.5 ppm / 20.0 ppm / 3.7 ppm	0.1563	0.1120	0.1640	0.2750	0.4110	0.4640	0.1530	0.0940	0.0740	0.0543
1.5 ppm / 20.0 ppm / 3.7 ppm	0.1570	0.1180	0.1710	0.2726	0.4152	0.4480	0.1580	0.0972	0.0703	0.0550
1.5 ppm / 20.0 ppm / 3.7 ppm	0.1660	0.1100	0.1720	0.2776	0.4140	0.4600	0.1514	0.0930	0.0750	0.0590
1.5 ppm / 20.0 ppm / 3.7 ppm	0.1602	0.1100	0.1650	0.2796	0.4120	0.4720	0.1544	0.0962	0.0680	0.0610

1.5 ppm / 20.0 ppm / 3.7 ppm	0.1620	0.1080	0.1740	0.2660	0.4082	0.4590	0.1514	0.0930	0.0653	0.0570
1.5 ppm / 20.0 ppm / 3.7 ppm	0.1553	0.1060	0.1740	0.2740	0.4192	0.4770	0.1570	0.0960	0.0700	0.0513
1.5 ppm / 20.0 ppm / 3.7 ppm	0.1580	0.1190	0.1710	0.2786	0.4242	0.4650	0.1564	0.0981	0.0693	0.0592
1.5 ppm / 20.0 ppm / 3.7 ppm	0.1560	0.1090	0.1660	0.2820	0.4272	0.4580	0.1514	0.0960	0.0710	0.0553
1.5 ppm / 20.0 ppm / 3.7 ppm	0.1530	0.1180	0.1801	0.2690	0.4270	0.4510	0.1495	0.0950	0.0700	0.0540
1.5 ppm / 20.0 ppm / 3.7 ppm	0.1573	0.1140	0.1730	0.2706	0.4001	0.4750	0.1510	0.0922	0.0683	0.0563
1.5 ppm / 20.0 ppm / 3.7 ppm	0.1610	0.1120	0.1650	0.2836	0.4210	0.4600	0.1574	0.0970	0.0730	0.0550
1.5 ppm / 20.0 ppm / 3.7 ppm	0.1563	0.1110	0.1670	0.2655	0.4050	0.4450	0.1500	0.0980	0.0693	0.0563
1.5 ppm / 20.0 ppm / 3.7 ppm	0.1660	0.1120	0.1760	0.2670	0.4010	0.4640	0.1564	0.0932	0.0683	0.0570
1.5 ppm / 20.0 ppm / 3.7 ppm	0.1560	0.1150	0.1750	0.2756	0.4010	0.4500	0.1550	0.1000	0.0690	0.0560
1.5 ppm / 20.0 ppm / 3.7 ppm	0.1563	0.1080	0.1670	0.2840	0.4020	0.4700	0.1510	0.0991	0.0700	0.0582
1.9 ppm / 25.0 ppm / 4.6 ppm	0.1570	0.1138	0.1637	0.2750	0.3960	0.4550	0.1553	0.1020	0.0700	0.0580
1.9 ppm / 25.0 ppm / 4.6 ppm	0.1610	0.1150	0.1660	0.2548	0.4104	0.4410	0.1540	0.0977	0.0750	0.0590
1.9 ppm / 25.0 ppm / 4.6 ppm	0.1600	0.1100	0.1657	0.2764	0.4140	0.4559	0.1600	0.1010	0.0711	0.0590
1.9 ppm / 25.0 ppm / 4.6 ppm	0.1590	0.1120	0.1690	0.2710	0.4120	0.4590	0.1560	0.0967	0.0750	0.0598
1.9 ppm / 25.0 ppm / 4.6 ppm	0.1565	0.1138	0.1710	0.2620	0.4060	0.4538	0.1600	0.1026	0.0740	0.0549
1.9 ppm / 25.0 ppm / 4.6 ppm	0.1625	0.1060	0.1720	0.2713	0.4110	0.4600	0.1563	0.0977	0.0769	0.0579
1.9 ppm / 25.0 ppm / 4.6 ppm	0.1625	0.1130	0.1740	0.2672	0.4156	0.4630	0.1582	0.1020	0.0760	0.0600
1.9 ppm / 25.0 ppm / 4.6 ppm	0.1570	0.1067	0.1630	0.2692	0.4070	0.4630	0.1610	0.0960	0.0730	0.0588
1.9 ppm / 25.0 ppm / 4.6 ppm	0.1605	0.1138	0.1637	0.2760	0.4053	0.4467	0.1560	0.0980	0.0769	0.0560
1.9 ppm / 25.0 ppm / 4.6 ppm	0.1570	0.1110	0.1688	0.2710	0.3869	0.4540	0.1563	0.0980	0.0700	0.0610
1.9 ppm / 25.0 ppm / 4.6 ppm	0.1565	0.1077	0.1620	0.2744	0.3960	0.4650	0.1560	0.1010	0.0740	0.0618
1.9 ppm / 25.0 ppm / 4.6 ppm	0.1555	0.1138	0.1729	0.2785	0.4002	0.4477	0.1612	0.0960	0.0750	0.0620
1.9 ppm / 25.0 ppm / 4.6 ppm	0.1550	0.1090	0.1668	0.2661	0.4166	0.4416	0.1573	0.0997	0.0690	0.0588
1.9 ppm / 25.0 ppm / 4.6 ppm	0.1610	0.1140	0.1700	0.2764	0.3982	0.4620	0.1590	0.0997	0.0691	0.0550
1.9 ppm / 25.0 ppm / 4.6 ppm	0.1615	0.1098	0.1719	0.2750	0.4145	0.4480	0.1600	0.1026	0.0700	0.0569
1.9 ppm / 25.0 ppm / 4.6 ppm	0.1610	0.1060	0.1657	0.2661	0.4104	0.4579	0.1592	0.0970	0.0740	0.0618
1.9 ppm / 25.0 ppm / 4.6 ppm	0.1585	0.1098	0.1729	0.2690	0.4140	0.4335	0.1612	0.0997	0.0720	0.0620
1.9 ppm / 25.0 ppm / 4.6 ppm	0.1565	0.1057	0.1719	0.2641	0.4000	0.4589	0.1553	0.1036	0.0720	0.0560
1.9 ppm / 25.0 ppm / 4.6 ppm	0.1595	0.1128	0.1680	0.2660	0.3971	0.4430	0.1573	0.1016	0.0720	0.0598
1.9 ppm / 25.0 ppm / 4.6 ppm	0.1615	0.1070	0.1660	0.2640	0.4063	0.4609	0.1560	0.1006	0.0740	0.0569
2.3ppm / 30.0 ppm / 5.6 ppm	0.1540	0.1024	0.1540	0.2550	0.4019	0.4490	0.1630	0.1025	0.0747	0.0580
2.3ppm / 30.0 ppm / 5.6 ppm	0.1540	0.1003	0.1630	0.2516	0.3770	0.4270	0.1601	0.1000	0.0730	0.0572
2.3ppm / 30.0 ppm / 5.6 ppm	0.1550	0.1030	0.1648	0.2495	0.3790	0.4280	0.1590	0.1000	0.0720	0.0592
2.3ppm / 30.0 ppm / 5.6 ppm	0.1560	0.1044	0.1570	0.2550	0.3791	0.4200	0.1650	0.1080	0.0728	0.0563

2.3ppm / 30.0 ppm / 5.6 ppm	0.1620	0.1003	0.1534	0.2484	0.4010	0.4450	0.1620	0.1000	0.0740	0.0572
2.3ppm / 30.0 ppm / 5.6 ppm	0.1570	0.0990	0.1550	0.2550	0.3870	0.4350	0.1630	0.1050	0.0718	0.0590
2.3ppm / 30.0 ppm / 5.6 ppm	0.1580	0.1024	0.1480	0.2661	0.3915	0.4527	0.1580	0.1006	0.0757	0.0601
2.3ppm / 30.0 ppm / 5.6 ppm	0.1570	0.1040	0.1510	0.2578	0.3890	0.4404	0.1562	0.1035	0.0730	0.0570
2.3ppm / 30.0 ppm / 5.6 ppm	0.1610	0.1020	0.1513	0.2600	0.3791	0.4350	0.1620	0.1100	0.0730	0.0563
2.3ppm / 30.0 ppm / 5.6 ppm	0.1590	0.1044	0.1570	0.2495	0.3870	0.4301	0.1688	0.1083	0.0730	0.0580
2.3ppm / 30.0 ppm / 5.6 ppm	0.1550	0.1085	0.1544	0.2588	0.3710	0.4260	0.1668	0.1045	0.0800	0.0570
2.3ppm / 30.0 ppm / 5.6 ppm	0.1620	0.1024	0.1580	0.2500	0.3880	0.4370	0.1678	0.1000	0.0747	0.0580
2.3ppm / 30.0 ppm / 5.6 ppm	0.1560	0.1050	0.1544	0.2495	0.3926	0.4404	0.1649	0.0987	0.0785	0.0590
2.3ppm / 30.0 ppm / 5.6 ppm	0.1570	0.1060	0.1600	0.2650	0.3800	0.4249	0.1580	0.1020	0.0766	0.0582
2.3ppm / 30.0 ppm / 5.6 ppm	0.1540	0.1044	0.1524	0.2703	0.3760	0.4301	0.1601	0.1045	0.0710	0.0560
2.3ppm / 30.0 ppm / 5.6 ppm	0.1560	0.1020	0.1544	0.2550	0.3791	0.4260	0.1610	0.1050	0.0737	0.0570
2.3ppm / 30.0 ppm / 5.6 ppm	0.1570	0.1020	0.1575	0.2440	0.4039	0.4340	0.1610	0.1092	0.0747	0.0582
2.3ppm / 30.0 ppm / 5.6 ppm	0.1540	0.1030	0.1555	0.2464	0.3822	0.4229	0.1570	0.1035	0.0760	0.0630
2.3ppm / 30.0 ppm / 5.6 ppm	0.1580	0.1050	0.1570	0.2500	0.3822	0.4506	0.1650	0.1025	0.0760	0.0601
2.3ppm / 30.0 ppm / 5.6 ppm	0.1550	0.1013	0.1596	0.2505	0.3960	0.4260	0.1571	0.1020	0.0804	0.0582

Table S5 Output calibration / Prediction data set of the quantitative assay for Cu²⁺ in the mixtures

Cu²⁺			
Calibration data set		Prediction data set	
Actual Cu ²⁺ (ppm)	Predicted Cu ²⁺ (ppm)	Actual Cu ²⁺ (ppm)	Predicted Cu ²⁺ (ppm)
0	-0.04	0.4	0.77
0	-0.10	0.4	0.26
0	0.10	0.4	0.38
0	0.00	0.4	0.70
0	0.04	0.4	0.41
0	-0.07	0.4	0.47
0	0.10	0.4	0.19
0	-0.08	0.4	0.31
0	-0.04	0.4	0.23
0	-0.11	0.4	0.32
0	-0.03	0.4	0.31
0	-0.02	0.4	0.13
0	0.02	0.4	0.42
0	-0.11	0.4	0.34
0	-0.10	0.4	0.25
0	0.09	0.4	0.30
0	-0.11	0.4	0.65
0	-0.10	0.4	0.35
0	0.10	0.4	0.35
0	-0.10	0.4	0.28
0.1	-0.04	1.9	2.04
0.1	-0.10	1.9	2.07
0.1	0.10	1.9	1.74
0.1	0.00	1.9	1.76
0.1	0.04	1.9	1.86
0.1	-0.07	1.9	2.05
0.1	0.10	1.9	1.87
0.1	-0.08	1.9	1.94
0.1	-0.04	1.9	1.97
0.1	-0.11	1.9	2.01

0.1	-0.03	1.9	1.94
0.1	-0.02	1.9	1.99
0.1	0.02	1.9	1.71
0.1	-0.11	1.9	1.64
0.1	-0.10	1.9	1.78
0.1	0.09	1.9	1.80
0.1	-0.11	1.9	2.02
0.1	-0.10	1.9	2.07
0.1	0.10	1.9	2.15
0.1	-0.10	1.9	2.03
0.2	0.30		
0.2	0.24		
0.2	0.09		
0.2	0.16		
0.2	0.27		
0.2	0.12		
0.2	0.21		
0.2	0.23		
0.2	0.19		
0.2	0.28		
0.2	0.28		
0.2	0.05		
0.2	0.31		
0.2	0.24		
0.2	0.30		
0.2	0.14		
0.2	0.31		
0.2	0.13		
0.2	0.34		
0.2	0.31		
0.5	0.43		
0.5	0.59		
0.5	0.55		
0.5	0.40		
0.5	0.61		

0.5	0.66
0.5	0.40
0.5	0.40
0.5	0.43
0.5	0.46
0.5	0.58
0.5	0.61
0.5	0.61
0.5	0.40
0.5	0.40
0.5	0.61
0.5	0.60
0.5	0.56
0.5	0.59
0.5	0.61
0.8	0.73
0.8	0.70
0.8	0.81
0.8	0.75
0.8	0.70
0.8	0.80
0.8	0.73
0.8	0.75
0.8	0.91
0.8	0.70
0.8	0.82
0.8	0.73
0.8	0.69
0.8	0.70
0.8	0.69
0.8	0.69
0.8	0.79
0.8	0.70
0.8	0.70
0.8	0.69

1.1	1.00
1.1	0.99
1.1	1.00
1.1	1.21
1.1	1.18
1.1	1.00
1.1	1.20
1.1	1.17
1.1	1.10
1.1	1.18
1.1	1.00
1.1	1.00
1.1	0.97
1.1	1.07
1.1	1.21
1.1	1.20
1.1	1.21
1.1	0.99
1.1	1.00
1.1	0.99
1.5	1.42
1.5	1.47
1.5	1.56
1.5	1.39
1.5	1.27
1.5	1.45
1.5	1.61
1.5	1.56
1.5	1.53
1.5	1.40
1.5	1.37
1.5	1.51
1.5	1.37
1.5	1.42
1.5	1.54

1.5	1.56
1.5	1.70
1.5	1.40
1.5	1.42
1.5	1.60
2.3	2.19
2.3	2.20
2.3	2.19
2.3	2.20
2.3	2.20
2.3	2.28
2.3	2.20
2.3	2.29
2.3	2.31
2.3	2.25
2.3	2.41
2.3	2.24
2.3	2.19
2.3	2.19
2.3	2.23
2.3	2.23
2.3	2.24
2.3	2.41
2.3	2.29
2.3	2.29

Table S6 Output calibration / Prediction data set of the quantitative assay for Ni²⁺ in the mixtures

Ni ²⁺			
Calibration data set		Prediction data set	
Actual Ni ²⁺ (ppm)	Predicted Ni ²⁺ (ppm)	Actual Ni ²⁺ (ppm)	Predicted Ni ²⁺ (ppm)
0	-0.44	5	8.43
0	-0.98	5	4.53
0	0.97	5	2.61
0	-0.49	5	7.66
0	0.40	5	4.56
0	-0.98	5	5.68
0	0.98	5	2.47
0	-0.48	5	3.60
0	-0.96	5	1.94
0	-1.71	5	3.47
0	-0.51	5	3.16
0	0.00	5	1.33
0	0.27	5	5.21
0	-0.98	5	4.64
0	-0.98	5	3.41
0	0.98	5	3.62
0	-0.98	5	7.62
0	-0.75	5	4.62
0	0.98	5	4.09
0	-0.98	5	3.64
1	1.98	25	27.97
1	1.97	25	28.64
1	1.98	25	24.21
1	1.98	25	23.07
1	1.98	25	24.32
1	0.02	25	25.86
1	0.42	25	24.81
1	1.19	25	26.36
1	1.36	25	27.14
1	3.55	25	27.39

1	1.98	25	25.34
1	1.79	25	26.87
1	1.98	25	23.79
1	0.04	25	21.24
1	1.07	25	23.02
1	1.98	25	24.96
1	1.26	25	26.32
1	1.98	25	28.01
1	1.98	25	27.82
1	1.51	25	27.17
3	3.98		
3	3.43		
3	1.60		
3	2.11		
3	3.98		
3	2.02		
3	3.21		
3	3.17		
3	2.90		
3	3.98		
3	3.98		
3	1.65		
3	5.56		
3	3.16		
3	4.14		
3	2.23		
3	3.98		
3	2.02		
3	4.70		
3	3.98		
7	6.60		
7	7.50		
7	7.56		
7	6.02		
7	7.98		

7	9.54
7	6.03
7	6.02
7	6.02
7	7.65
7	7.21
7	7.98
7	7.98
7	6.02
7	6.02
7	7.94
7	7.98
7	7.98
7	7.98
7	7.98
10	10.41
10	9.02
10	9.46
10	9.71
10	10.76
10	9.02
10	10.06
10	9.03
10	10.98
10	10.29
10	10.61
10	9.02
10	9.02
10	9.02
10	9.02
10	9.02
10	10.08
10	10.01
10	9.02
10	10.66

15	14.02
15	14.02
15	14.02
15	16.82
15	14.02
15	14.02
15	15.98
15	15.98
15	15.57
15	15.97
15	14.02
15	14.80
15	13.56
15	14.03
15	15.98
15	15.98
15	15.98
15	14.02
15	14.02
15	14.10
20	19.02
20	19.73
20	20.91
20	19.02
20	17.09
20	19.29
20	20.98
20	20.37
20	20.98
20	19.02
20	18.41
20	20.12
20	18.28
20	19.02
20	20.98

20	20.38
20	22.44
20	19.02
20	19.02
20	20.98
30	28.80
30	29.46
30	29.02
30	29.21
30	29.03
30	30.32
30	29.02
30	30.46
30	30.12
30	29.74
30	30.98
30	30.00
30	30.88
30	29.02
30	30.37
30	30.35
30	29.02
30	31.92
30	30.98
30	30.09

Table S7 Output calibration / Prediction data set of the quantitative assay for Zn²⁺ in the mixtures

Zn²⁺			
Calibration data set		Prediction data set	
Actual Zn ²⁺ (ppm)	Predicted Zn ²⁺ (ppm)	Actual Zn ²⁺ (ppm)	Predicted Zn ²⁺ (ppm)
0	-0.04	0.9	1.39
0	-0.10	0.9	0.76
0	0.17	0.9	0.43
0	-0.02	0.9	1.45
0	0.10	0.9	0.88
0	-0.27	0.9	0.69
0	0.10	0.9	0.47
0	-0.10	0.9	0.70
0	-0.13	0.9	0.31
0	-0.20	0.9	0.56
0	-0.04	0.9	0.58
0	0.02	0.9	0.25
0	0.04	0.9	0.68
0	-0.14	0.9	0.97
0	-0.10	0.9	0.72
0	0.07	0.9	0.50
0	-0.10	0.9	1.38
0	-0.06	0.9	0.72
0	0.34	0.9	0.76
0	-0.10	0.9	0.54
0.2	0.55	4.6	5.02
0.2	0.30	4.6	5.11
0.2	0.30	4.6	4.34
0.2	0.39	4.6	4.09
0.2	0.21	4.6	4.36
0.2	0.18	4.6	4.54
0.2	0.27	4.6	4.41
0.2	0.10	4.6	4.75
0.2	0.30	4.6	4.79
0.2	0.84	4.6	4.75

0.2	0.37	4.6	4.70
0.2	0.30	4.6	4.97
0.2	0.53	4.6	4.54
0.2	0.10	4.6	3.95
0.2	0.20	4.6	4.12
0.2	0.30	4.6	4.62
0.2	0.30	4.6	4.95
0.2	0.63	4.6	5.08
0.2	0.30	4.6	5.06
0.2	0.25	4.6	4.72
0.6	0.70		
0.6	0.70		
0.6	0.10		
0.6	0.35		
0.6	0.72		
0.6	0.42		
0.6	0.67		
0.6	0.51		
0.6	0.70		
0.6	0.87		
0.6	0.70		
0.6	0.46		
0.6	1.18		
0.6	0.64		
0.6	0.84		
0.6	0.50		
0.6	0.70		
0.6	0.50		
0.6	1.00		
0.6	0.81		
1.3	1.20		
1.3	1.40		
1.3	1.37		
1.3	1.20		
1.3	1.40		

1.3	2.11
1.3	1.31
1.3	1.20
1.3	1.20
1.3	1.40
1.3	1.40
1.3	1.40
1.3	1.40
1.3	1.20
1.3	1.22
1.3	1.40
1.3	1.40
1.3	1.40
1.3	1.40
1.3	1.55
1.9	1.87
1.9	1.80
1.9	1.80
1.9	1.80
1.9	2.00
1.9	1.80
1.9	1.93
1.9	1.80
1.9	2.14
1.9	2.00
1.9	2.00
1.9	1.80
1.9	1.80
1.9	1.56
1.9	1.80
1.9	1.80
1.9	2.00
1.9	1.88
1.9	1.80
1.9	2.00

2.8	2.70
2.8	2.70
2.8	2.58
2.8	3.28
2.8	2.70
2.8	2.70
2.8	2.96
2.8	2.90
2.8	2.90
2.8	3.00
2.8	2.70
2.8	2.70
2.8	2.50
2.8	2.70
2.8	3.24
2.8	2.79
2.8	2.92
2.8	2.70
2.8	2.54
2.8	2.70
3.7	3.56
3.7	3.60
3.7	3.80
3.7	3.47
3.7	2.96
3.7	3.60
3.7	3.80
3.7	3.60
3.7	3.80
3.7	3.60
3.7	3.28
3.7	3.70
3.7	3.32
3.7	3.33
3.7	3.81

3.7	3.72
3.7	4.02
3.7	3.41
3.7	3.50
3.7	3.89
5.6	5.35
5.6	5.43
5.6	5.31
5.6	5.43
5.6	5.47
5.6	5.56
5.6	5.50
5.6	5.65
5.6	5.56
5.6	5.63
5.6	5.70
5.6	5.50
5.6	5.68
5.6	5.41
5.6	5.59
5.6	5.54
5.6	5.36
5.6	5.92
5.6	5.70
5.6	5.50

7. References

1. J. R. Lakowicz, *Principles of Fluorescence Spectroscopy* 3rd Ed., Springer, New York, USA, 2006.
2. R. G. Brereton, *Applied Chemometrics for Scientists*, Wiley, Chichester, U.K., 2007.
3. (a) T. Minami, N. A. Esipenko, B. Zhang, M. E. Kozelkova, L. Isaacs, R. Nishiyabu, Y. Kubo and P. Anzenbacher, Jr., *J. Am. Chem. Soc.*, 2012, **134**, 20021; (b) T. Minami, N. A. Esipenko, A. Akdeniz, B. Zhang, L. Isaacs and P. Anzenbacher, Jr., *J. Am. Chem. Soc.*, 2013, **135**, 15238; (c) T. Minami, Y. Liu, A. Akdeniz, P. Koutnik, N. A. Esipenko, R. Nishiyabu, Y. Kubo and P. Anzenbacher, Jr., *J. Am. Chem. Soc.*, 2014, **136**, 11396; (d) D. Zamora-Olivares, T. S. Kaoud, J. Jose, A. Ellington, K. N. Dalby and E. V. Anslyn, *Angew. Chem. Int. Ed.*, 2014, **53**, 14064.