



Nederlands Forensisch Instituut
Ministerie van Justitie en Veiligheid

Vakbijlage

Chemisch Identificatie Onderzoek

Op zoek naar stoffen en hun betekenis

Versie 1, september 2026



Inhoudsopgave

1	Algemeen	3
2	Inleiding	3
3	NFI-producten, complexiteit en vraagstelling	4
4	Aanpak van het onderzoek	5
4.1	Een nieuwe zaak	5
4.2	Vooronderzoek en bemonstering	6
4.3	Extracties	7
4.4	Analyse	8
4.4.1	<i>Gaschromatografie met vlamionisatiedetectie of thermische geleidingsdetectie</i>	8
4.4.2	<i>Gaschromatografie met massaspectrometrie</i>	10
4.4.3	<i>Vloeistofchromatografie met fotodiodearray spectroscopie en hoge resolutie massaspectrometrie</i>	11
4.4.4	<i>Ionchromatografie met massaspectrometrische detectie</i>	13
4.4.5	<i>Fourier getransformeerde infrarood spectroscopie</i>	13
4.4.6	<i>Overige technieken</i>	14
4.4.7	<i>Kwalitatief en kwantitatief onderzoek</i>	15
5	Interpretatie en conclusie	15
6	Aandachtspunten bij insturen stukken van overtuiging	17
7	Kwaliteitsborging	18
8	Afkortingenlijst	19
9	Meer weten?	20

1 Algemeen

Het Nederlands Forensisch Instituut (NFI) kent een groot aantal typen onderzoek. Als toelichting op de onderzoeken zijn er voor veel onderzoeksgebieden vakbijlagen beschikbaar. De vakbijlage geeft verduidelijking over de onderzoeksmogelijkheden en over hoe en met welke technieken en hulpmiddelen een dergelijk onderzoek over het algemeen plaatsvindt. De vakbijlage heeft een zuiver informatief karakter. De informatie die van toepassing is op een specifieke zaak staat altijd in het onderzoeksrapport vermeld. Aan het eind van de vakbijlage is een afkortingenlijst opgenomen.

2 Inleiding

Eén van de onderzoeksgebieden binnen het NFI is het Chemisch Identificatie Onderzoek (CIO). Hier komen velerlei vragen binnen over de identificatie, herkomst en/of vergelijking van stoffen, die niet passen in een van de andere onderzoeksgebieden op het NFI waar ook chemisch onderzoek wordt uitgevoerd (zoals bijvoorbeeld verdovende middelen, explosies en explosieven of het chemisch brandonderzoek). Het chemisch identificatie onderzoek is veel minder gekaderd dan deze andere onderzoeksgebieden en de vraagstellingen zijn zeer divers. Vaste stoffen, vloeistoffen en/of gassen kunnen in een verscheidenheid aan zaken worden onderworpen aan een chemische analyse om (een deel van) de samenstelling vast te stellen en, wanneer gewenst, te vergelijken. Enkele voorbeelden zijn vragen over de vergelijking van een vlek met een product, de identificatie van de bijtende stof waarmee iemand is overgoten, de aanwezigheid van glijmiddel of massageolie bij een zedendelict, de aanwezigheid van pepperspray op kleding, de identificatie van een onbekende vloeistof, de identificatie van de stof die aan een drankje is toegevoegd en de vergelijking van schoonmaakmiddelen. De achterliggende vragen kunnen bijvoorbeeld gaan over schadelijke inwerking van chemische stoffen op mens of natuur, over het vaststellen welke handelingen er op een plaats delict hebben plaatsgevonden of over het vaststellen van een connectie tussen een verdachte en iets wat op een plaats delict is aangetroffen. Een grote diversiteit aan vragen, vaak maatwerk, waarvoor geen gekaderde, standaardaanpak bestaat.¹ Er worden dan ook verschillende technieken ingezet, afhankelijk van de te onderzoeken stukken van overtuiging en de bijbehorende vraag. Deze vakbijlage geeft in zijn algemeenheid weer volgens welke methoden en met welke technieken en hulpmiddelen onderzoeken bij het chemisch identificatie onderzoek in de meeste gevallen plaatsvinden.

¹ Zie hoofdstuk 7 over de wijze van kwaliteitsborging.

verdwijnen, afhankelijk van de omstandigheden waar het stuk van overtuiging aan heeft blootgestaan alvorens het werd veiliggesteld. Denk bijvoorbeeld aan vluchtige stoffen die wanneer de drager ergens lang heeft gelegen of de verpakking niet geschikt is kunnen verdwijnen. Ook het materiaal waarmee wordt veiliggesteld kan een bron zijn van storende stoffen. Dit kan het onderzoek het karakter geven van het zoeken naar een speld in een hooiberg, waarbij het soms zelfs niet eens duidelijk is dat het een speld is die we zoeken. Het is dan ook heel belangrijk bij de aanvraag een concrete vraagstelling te formuleren. Welke informatie moet het onderzoek opleveren? Goed verpakte stukken van overtuiging, de vraagstelling en eventueel overleg met de opdrachtgever of aanvrager om het onderzoek de gewenste focus te geven zijn bepalende factoren voor het succes van het onderzoek. Overleg over de mogelijkheden tussen opdrachtgever of aanvrager en de deskundigen van het chemisch identificatie onderzoek kan voorafgaand aan een aanvraag op initiatief van de opdrachtgever of aanvrager, maar kan ook worden geïnitieerd door de deskundigen van het chemisch identificatie onderzoek op basis van een ontvangen aanvraag.

Omdat het vaak bijzondere vragen zijn die bij het chemisch identificatie onderzoek binnen komen, bestaat er in veel gevallen geen vooraf bekende standaardaanpak. Dit wordt per geval beoordeeld. Het uitdenken en uittesten van een passende onderzoeksstrategie is vaak een tijdrovende zaak, waardoor levertijden van dergelijke maatwerkzaken afhankelijk van de complexiteit sterk kunnen variëren. Waar nodig zullen hier passende afspraken over worden gemaakt met de opdrachtgever. Wanneer aan een stuk van overtuiging vanuit verschillende disciplines onderzoek moet worden gedaan, wordt er intern in overleg bepaald in welke volgorde de onderzoeken worden uitgevoerd om zo gezamenlijk tot een optimale multidisciplinaire aanpak te komen.

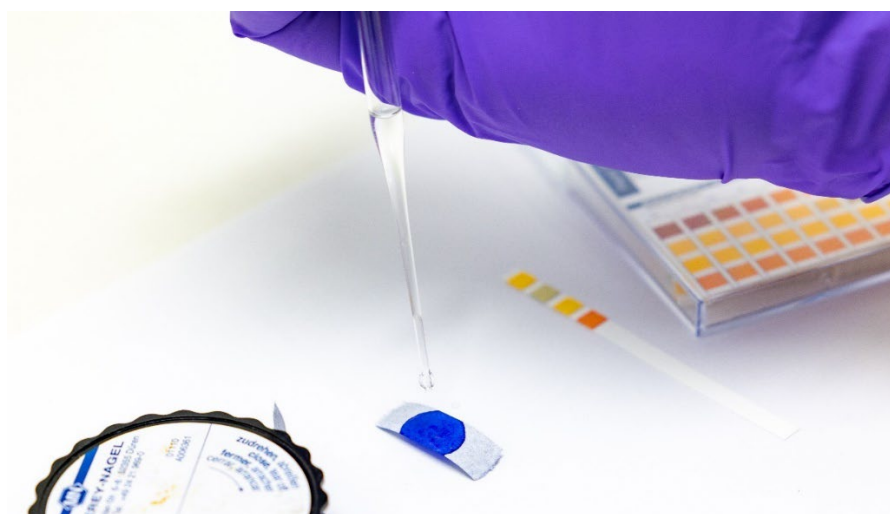
4 Aanpak van het onderzoek

4.1 Een nieuwe zaak

Wanneer een nieuwe zaak voor chemisch identificatie onderzoek binnenkomt, wordt de aanvraag eerst goed doorgenomen. Hierbij wordt beoordeeld of de stukken van overtuiging kloppen met de omschrijving ervan, of de vraagstelling duidelijk is, of we deze vraag kunnen beantwoorden en of de verpakking geschikt is voor het gevraagde onderzoek. Ook wordt bekeken of er sprake is van een multidisciplinaire aanvraag, om een gezamenlijk vooronderzoek in te kunnen plannen. Als er hierbij onduidelijkheden worden geconstateerd, wordt contact opgenomen met de opdrachtgever of aanvrager om deze te bespreken. Wanneer er geen belemmeringen voor het onderzoek zijn, wordt een vooronderzoek gestart.

4.2 Vooronderzoek en bemonstering

Alvorens tot het bepalen van een onderzoeksstrategie wordt overgegaan, wordt een stuk van overtuiging eerst onderworpen aan een vooronderzoek. Hierbij wordt in het licht van de vraagstelling het stuk van overtuiging visueel geïnspecteerd en fotografisch vastgelegd. Er wordt bepaald hoe en, indien van belang, waar het stuk van overtuiging bemonsterd wordt voor nader onderzoek. In sommige gevallen wordt hierbij gebruik gemaakt van speciale (forensische) lichtbronnen. Om bij vragen over identificatie van vloeistoffen alvast enige richting te krijgen kunnen enkele indicatieve (kleur)testen al informatie geven over bijvoorbeeld de aanwezigheid van water of bepaalde ionen (geladen deeltjes) in de vloeistof. Ook kunnen, met hulp van onderzoekers van biologische sporen op het NFI, vlekken met behulp van de tetrabasetest op de aanwezigheid van bloed worden gecontroleerd. Als het te onderzoeken stuk van overtuiging een waterige oplossing is, wordt met behulp van een pH-teststrook indicatief de zuurgraad van de vloeistof bepaald. De zuurgraad van een waterige oplossing geeft aan hoe zuur of basisch de vloeistof is. De pH is een maat voor deze zuurgraad. De pH van een neutrale waterige oplossing is 7. Zure oplossingen hebben een pH lager dan 7 en basische oplossingen hebben een pH hoger dan 7. Ook van vlekken is het mogelijk om met behulp van een bevochtigde pH-teststrook de zuurgraad van de stof(fen) in de vlek indicatief te bepalen. Zie figuur 2 voor een test op de aanwezigheid van water en een pH-teststrook.

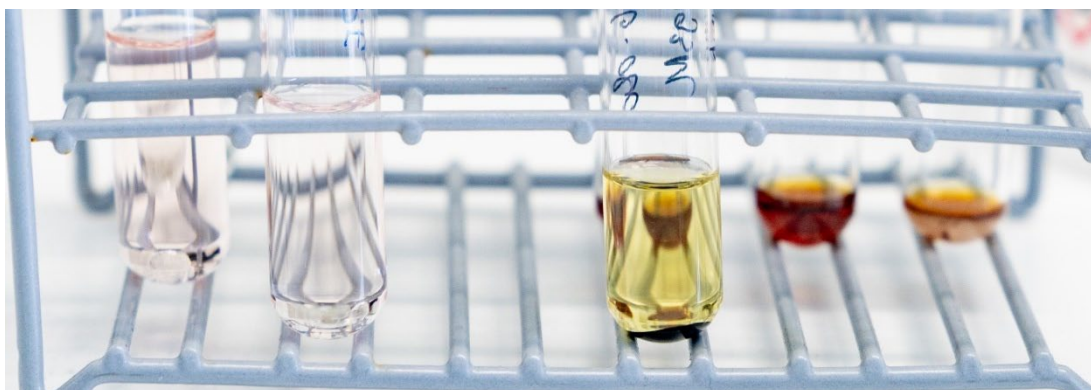


Figuur 2 Op de voorgrond een stukje Watesmo testpapier, wat blauw kleurt in de aanwezigheid van water. Op de achtergrond een pH-teststrook om een indicatie van de zuurgraad van een oplossing te krijgen.

Op basis van de vraagstelling en de bevindingen uit het vooronderzoek wordt een onderzoeksstrategie met de geschikte analysetechniek(en) bepaald en opgenomen in een onderzoeksplan. In het onderzoeksplan wordt ook aandacht besteed aan contaminatierisico, kwaliteitsborging en persoonlijke veiligheid. Afhankelijk van de gekozen analysetechniek(en) kan een voorbehandeling nodig zijn om het monster geschikt te maken voor de analyse. Ook dit wordt opgenomen in het onderzoeksplan.

4.3 Extracties

Het merendeel van de monsters waar chemisch identificatie onderzoek aan gedaan wordt zijn mengsels van meerdere stoffen. In veel gevallen zal het voor de identificatie en vergelijking van stoffen nodig zijn het mengsel zo goed mogelijk te scheiden in de verschillende stoffen waar dit mengsel uit bestaat. Dit gebeurt met chromatografie, een scheidingstechniek die zowel in de gas als in de vloeibare fase kan plaatsvinden. Om een stuk van overtuiging geschikt te maken voor dit soort analyses, zullen de relevante stoffen van het stuk van overtuiging in een oplossing moeten worden gebracht. Dit wordt extractie genoemd. Alleen wanneer het onderzoek zich richt op hele vluchtige stoffen die eenvoudig in de dampfase komen is extractie met vloeistof niet nodig en zal na verwarming de ontstane damp rechtstreeks worden onderzocht. Voor analyses met gaschromatografie gebeurt extractie afhankelijk van de te onderzoeken stof meestal met een organisch oplosmiddel zoals petroleumether, dichloormethaan of aceton, maar het kan ook met andere organische oplosmiddelen als dat beter bij het te onderzoeken materiaal past. Voor vloeistofchromatografie wordt meestal gebruik gemaakt van water, methanol en/of isopropyl alcohol als oplosmiddel bij de extractie.



Figuur 3 Reageerbuizen met vloeibaar onderzoeksmateriaal.

Om de relevante stoffen uit het stuk van overtuiging te extraheren kan een deel van het stuk van overtuiging worden uitgeknipt en in het oplosmiddel worden gebracht. Wanneer knippen geen optie is, kan het stuk van overtuiging worden afgespoeld met het oplosmiddel of worden afgenomen met bijvoorbeeld een schone tissue of filtreerpapiertje, waarna de tissue of het filtreerpapiertje in het oplosmiddel wordt gebracht. De hierbij verkregen extracten zijn, eventueel na centrifugeren, geschikt voor scheiding en de detectie van de aanwezige stoffen (zie figuur 3). Bij sterk geconcentreerde extracten of bij aangeleverde vloeistoffen waarbij geen extractie nodig is, wordt soms nog een extra verdunning toegepast om overbelading van de analyseapparatuur te voorkomen. Voor speciale analyses gericht op bepaalde specifieke stoffen of bij sterk vervuilde monsters kan het nodig zijn veel uitgebreidere voorbehandelingsprotocollen en/of opschoningsstappen te volgen. Voorbeelden hiervan zijn de bepaling van een vetzuursamenstelling of analyse van traanverwekkende stoffen op vervuilde kleding.

4.4 Analyse

Om de aanwezige stoffen in een (monster van een) stuk van overtuiging te kunnen identificeren en eventueel te vergelijken wordt bij het onderzoeksgebied chemisch identificatie onderzoek gebruik gemaakt van verschillende technieken. Welke techniek wanneer wordt ingezet is afhankelijk van het soort stoffen waarnaar gekeken moet worden en de hierbij geformuleerde vraagstelling. De meest voorkomende technieken zijn:

- Gaschromatografie met vlamionisatie- of thermische geleidbaarheidsdetectie (GC-FID/TCD)
- Gaschromatografie met massaspectrometrische detectie (GC-MS)
- Vloeistofchromatografie met fotodiodearray en hoge resolutie massaspectrometrische detectie (LC-PDA-HRMS)
- Ionchromatografie met massaspectrometrische detectie (IC-MS)
- Fourier getransformeerde infrarood spectroscopie (FT-IR)

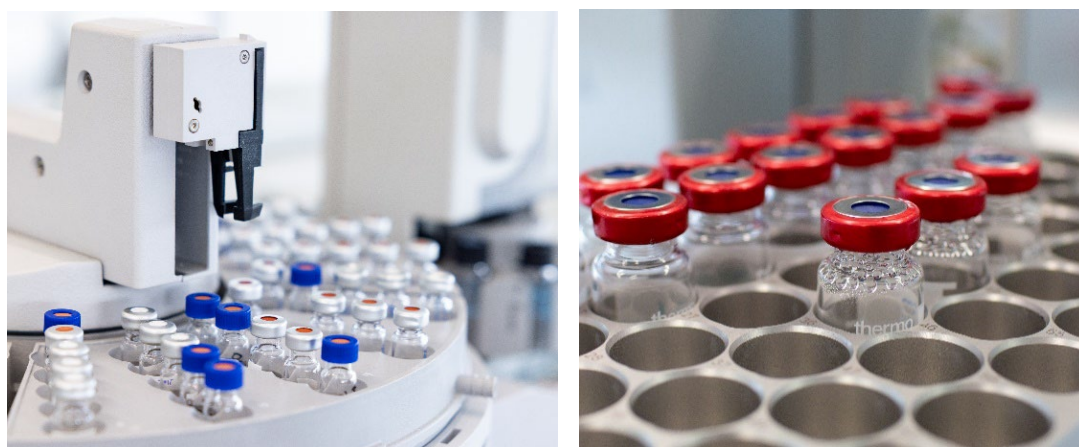
De chromatografische technieken zijn scheidingstechnieken waarmee een mengsel zo goed mogelijk gescheiden wordt in de verschillende stoffen waar het mengsel uit bestaat. Deze scheiding kan plaatsvinden nadat de stoffen in de gasfase gebracht worden. Dan spreken we van gaschromatografie (GC). Wanneer de scheiding in de vloeibare fase plaatsvindt, spreken we van vloeistofchromatografie (LC). Overeenkomend voor beide vormen is het feit dat de scheiding van het mengsel plaatsvindt in een kolom met daarin een stof, de stationaire fase, waar het monster langs wordt geleid en waar de verschillende stoffen in meer of mindere mate interactie mee hebben. Deze interactie is afhankelijk van de chemische structuur van de stationaire fase en de hier langs bewegende stoffen uit het mengsel. De stoffen met veel interactie met de stationaire fase bewegen langzamer door de kolom dan de stoffen met weinig interactie. Hierdoor ontstaat scheiding. Afhankelijk van het soort stoffen van interesse is er een ruime keus aan kolommen met verschillende stationaire fasen voor de optimale interactie en daarmee scheiding.

4.4.1 Gaschromatografie met vlamionisatiedetectie of thermische geleidingsdetectie

Met gaschromatografie kunnen zowel damp- als vloeistofmonsters worden geanalyseerd. Bij vloeistofanalyses wordt een kleine hoeveelheid van de vloeistof uit het monster (vaak een extract van het oorspronkelijke stuk van overtuiging) rechtstreeks de gaschromatograaf ingebracht, alwaar een hoge temperatuur zorgt voor de verdamping van de stoffen. Deze stoffen worden vervolgens meegevoerd met een draaggas (bijvoorbeeld helium) en door een lange kolom geleid. Deze kolom hangt in een oven, waarvan de temperatuur apart wordt ingesteld, ook weer afhankelijk van het te analyseren monster. Om naast scheiding door interactie met de stationaire fase in de kolom, ook scheiding op basis van vluchtigheid en kookpunt te faciliteren kan in de oven een temperatuurverloop worden ingesteld. De oven begint dan op een relatief lage temperatuur die

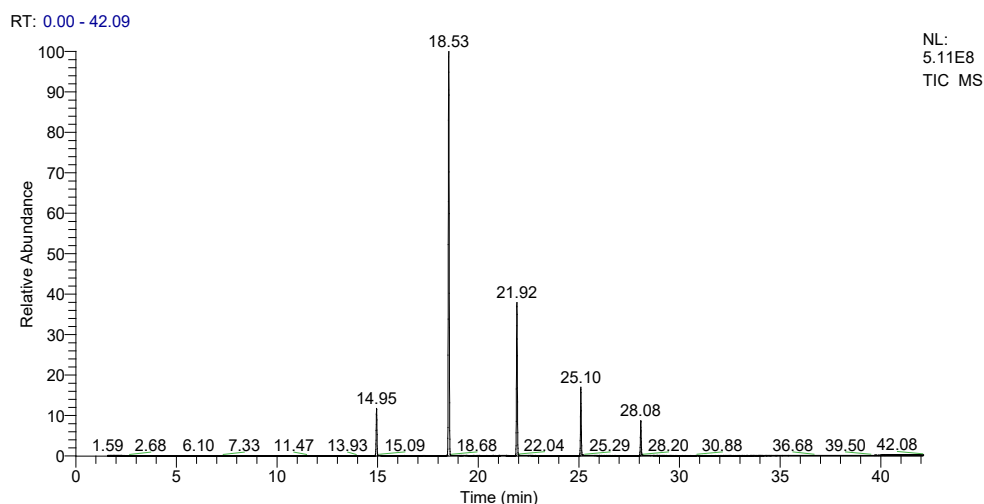
geleidelijk oploopt. De stoffen met hoge vluchtigheid en laag kookpunt zullen dan sneller door de kolom bewegen dan stoffen met een lage vluchtigheid en hoog kookpunt.

Het direct injecteren van dampmonsters maakt ook analyse van permanente gassen uit bijvoorbeeld gasflessen mogelijk, maar ook analyse van vluchtige stoffen afkomstig uit een vloeistof of vaste stof. Om voldoende van deze dampen vrij te krijgen uit vloeibare of vaste stoffen worden de monsters hiertoe in een luchtdicht glazen flesje of luchtdichte pot verwarmd tot 70 graden, waarna een monster wordt genomen van de bovenin het flesje of de pot verzamelde vluchtige stoffen. Deze methode wordt de headspace (HS) methode genoemd en is primair geschikt voor de analyse van de meer vluchtige stoffen (zie figuur 4).



Figuur 4 Autosampler met glazen monsterflesjes voor analyse met gaschromatografie. Links voor vloeistofinjecties, rechts voor dampinjecties (headspace).

Eenmaal door de kolom bewogen worden de stoffen gedetecteerd. Een eenvoudige en robuuste GC-detector is de vlamionisatiedetector (FID), waarbij de stoffen door een waterstofvlam worden geleid. Hierdoor ontstaat een signaal in de vorm van een kleine elektrische stroom, wat als een piek wordt geregistreerd. De tijd die een stof erover doet van injectie tot detectie wordt de *retentietijd* genoemd. Verschillende stoffen hebben dus in veel gevallen verschillende retentietijden en geven bij detectie een piek waarvan de grootte mede afhankelijk is van de concentratie van de betreffende stof. Deze resultaten worden uitgezet in een grafiek waarin de intensiteit van het detectorsignaal wordt uitgezet tegen de retentietijd. Deze grafiek wordt het chromatogram genoemd (zie figuur 5). Op basis van retentietijden en in sommige gevallen het patroon dat de pieken met elkaar als geheel vormen, kan een indicatie van aanwezige stoffen worden verkregen en een vergelijking tussen mengsels worden gemaakt. Bij eenzelfde stof wordt eenzelfde retentietijd verwacht en bij eenzelfde samenstelling, wordt eenzelfde piekenpatroon verwacht.



Figuur 5 Een chromatogram van een lampolie met op de horizontale as de (retentie)tijd en op de verticale as de relatieve intensiteit van het detectorsignaal.

Een andere, ook relatief eenvoudige detector werkt op basis van thermische geleidbaarheid (TCD) van de gassen die uit de kolom komen. Deze wordt met name ingezet voor de analyse van permanente gassen en levert ook alleen pieken bij specifieke retentietijden op.

Het nadeel van dergelijke eenvoudige detectoren is dat deze beperkte informatie geven over de stoffen die de kolom uitkomen. De pieken laten zien dat er meetbare stoffen in het monster zitten, het piekenpatroon maakt het vergelijken met andere monsters mogelijk, maar de retentietijd en het piekenpatroon zijn slechts indicatief en meestal niet specifiek genoeg voor de identificatie van de aanwezige stoffen. Het is mogelijk dat andere stoffen met eenzelfde snelheid door de kolom bewegen en dus eenzelfde retentietijd hebben. Om meer zekerheid over de identiteit van de verschillende stoffen te krijgen, wordt gebruik gemaakt van een ander type detector: de massaspectrometer (MS).

4.4.2 Gaschromatografie met massaspectrometrie

Bij gaschromatografie-massaspectrometrie (GC-MS, zie figuur 6) worden de gescheiden stoffen bij het verlaten van de kolom van de GC een massaspectrometer ingeleid. De massaspectrometer zorgt voor het opbreken van de binnenkomende stoffen in kleinere fragmenten (fragmentatie) en is in staat om met grote precisie de massa van deze fragmenten te bepalen. Deze massa² wordt geregistreerd, waarbij de sterkte van het signaal representatief is voor de hoeveelheid van dat fragment. Dit wordt uitgezet in een grafiek: het massaspectrum (zie figuur 7). Het massaspectrum is kenmerkend voor een stof, onder gelijke omstandigheden zal deze stof op gelijke wijze fragmenteren en zal het massaspectrum er steeds hetzelfde uit zien. Op basis van dit massaspectrum kan, eventueel in combinatie met de retentietijd, de identiteit van de aanwezige stoffen worden

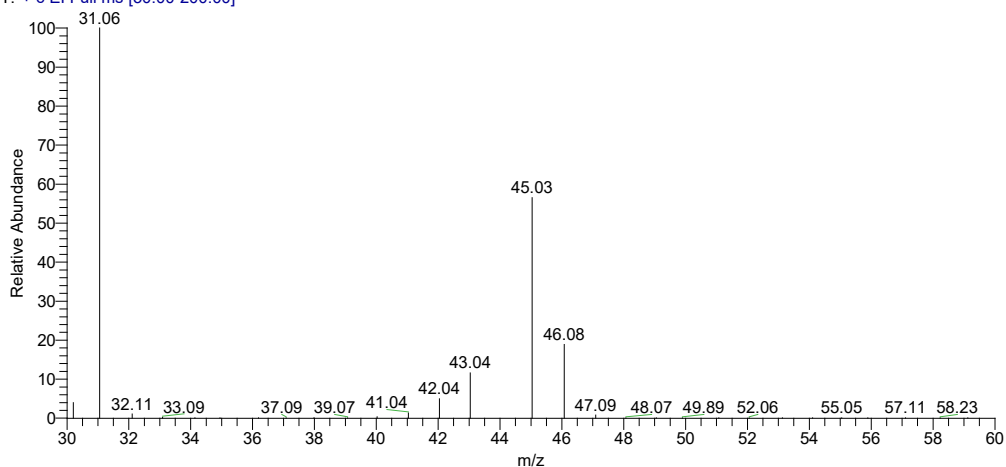
² Feitelijk speelt naast de massa ook de lading van de fragmenten een rol. Deze worden op elkaar gedeeld en geven de m/z -waarde. Omdat bij de analyses de meeste ladingen 1 zijn, komt de m/z -waarde doorgaans overeen met de massa van het fragment.

vastgesteld. Hierbij wordt gebruik gemaakt van internationale bibliotheken, waarin van een zeer groot aantal stoffen het massaspectrum ter vergelijking is opgeslagen.



Figuur 6 Een monster genomen uit een van de monsterflesjes wordt geïnjecteerd in de GC-MS.

21B97 #494 RT: 2.89 AV: 1 SB: 1 2.62 NL: 2.22E8
T: + c EI Full ms [30.00-200.00]



Figuur 7 Het massaspectrum van ethanol verkregen met GC-MS met op de horizontale as de massa/lading-verhouding (m/z) en op de verticale as de relatieve intensiteit van het signaal van de massaspectrometer.

4.4.3 Vloeistofchromatografie met fotodiodearray spectroscopie en hoge resolutie massaspectrometrie

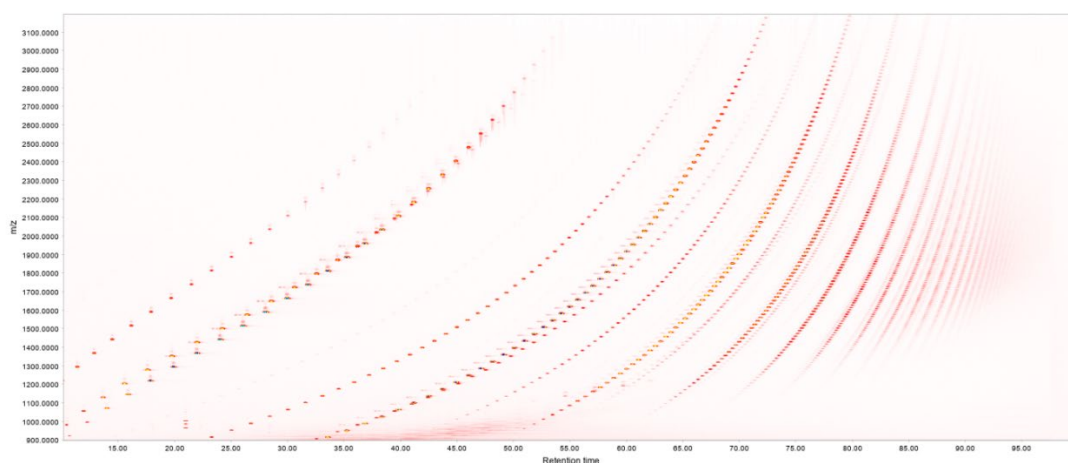
Bij vloeistofchromatografie (zie figuur 8) wordt een mengsel in vloeibare vorm met een eveneens vloeibare mobiele fase door de kolom geleid. Hier vindt scheiding plaats door verschil in interactie van de stoffen met de mobiele en de stationaire fase in deze kolom. Meer interactie met de

stationaire fase betekent minder interactie met de mobiele fase en dus een langzamere gang door de kolom dan een stof met meer affiniteit voor de mobiele fase.



Figuur 8 Autosampler met glazen monsterflesjes voor analyse met vloeistofchromatografie (LC).

Vloeistofchromatografie is complementair aan gaschromatografie en is toepasbaar voor andersoortige, minder vluchtige en sterker wateroplosbare stoffen. Na scheiding worden de afzonderlijke stoffen gedetecteerd. De fotodiodearray spectrofotometer (PDA) meet het absorptiespectrum³ van zichtbaar en ultraviolet licht van de gescheiden stoffen en de hoge resolutie massaspectrometer (HRMS) meet met hoge nauwkeurigheid de massa van de gescheiden stoffen (zie figuur 9).



Figuur 9 Een voorbeeld van een meetresultaat van een meting van een glijmiddel van een condoom met LC-HRMS, met op de horizontale as de (retentie)tijd en op de verticale as de massa/lading-verhouding (m/z). Dit wordt ook wel een ion map genoemd.

³ Er wordt licht met een bepaald golflengtebereik op de passerende stoffen geschonden en de mate van absorptie bij de verschillende golflengtes wordt geregistreerd.

Deze gescheiden stoffen kunnen na het meten van de massa op geavanceerde wijze nog een fragmentatiestap ondergaan, waarin ze worden opgebroken in kleinere fragmenten waar weer met hoge nauwkeurigheid de massa van wordt bepaald. Hierdoor ontstaat een nog kenmerkender massaspectrum (MS²). Op basis van de resultaten van de massaspectra kunnen, in combinatie met de retentietijd, de stoffen worden geïdentificeerd. De resultaten van de PDA kunnen hieraan bijdragen. Met name bij sterk lichtabsorberende stoffen, zoals kleurstoffen, is de PDA-meting van toegevoegde waarde.

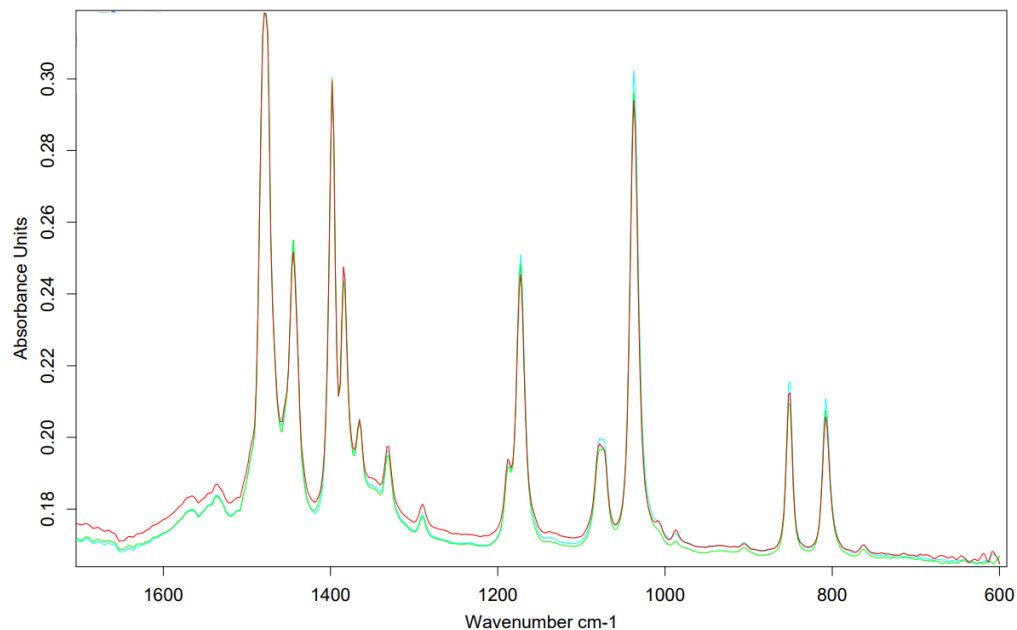
4.4.4 Ionchromatografie met massaspectrometrische detectie

Een speciale vorm van vloeistofchromatografie is ionchromatografie (IC). Bij ionchromatografie wordt een vloeistof onderzocht op de aanwezigheid van geladen deeltjes: ionen. Dit kunnen kationen met positieve lading of anionen met negatieve lading zijn. In de praktijk focust het onderzoek zich veelal op anionen. Anionen ontstaan onder andere als zuren oplossen in water. Deze analyse wordt daarom meestal ingezet in zaken waarin (sterke) zuren een rol spelen, zoals slachtoffers die overgoten zijn met een sterk zuur. Door vast te stellen welke anionen aanwezig zijn in een waterige oplossing kan afgeleid worden welk zuur in het water aanwezig is.

Bij ionchromatografie worden de ionen uit een monster eerst van elkaar gescheiden door het in meer of mindere mate uitwisselen van geladen deeltjes uit het monster met die van de stationaire fase in de kolom. Door deze eigenschap verplaatsen verschillende ionen zich met verschillende snelheid langs deze stationaire fase en worden vervolgens afzonderlijk gedetecteerd door een massaspectrometer. De ionen kunnen dan op basis van massa en eventuele fragmentatie van de ionen in combinatie met de retentietijd worden geïdentificeerd. In het geval dat het om een zuur gaat, geconstateerd door het bepalen van de pH, is dan meestal te achterhalen welk zuur in de oplossing zit. De grootte van het gemeten signaal is ook hier een maat voor de hoeveelheid van het betreffende ion en daarmee voor de concentratie. Zo kan ook bepaald worden hoe sterk geconcentreerd een zuur is.

4.4.5 Fourier getransformeerde infrarood spectroscopie

Naast chromatografische technieken wordt er ook gebruik gemaakt van spectroscopische technieken. Dit zijn technieken op basis van de interactie tussen licht en materie, zoals een PDA-detector dat bijvoorbeeld ook is. Een regelmatig toegepaste spectroscopische techniek bij het chemisch identificatie onderzoek is Fourier getransformeerde infraroodspectroscopie (FTIR). Bij deze techniek wordt gebruik gemaakt van het vermogen van stoffen om infrarood licht te absorberen. Hiertoe wordt een monster bestraald met infrarood licht over het hierbij passende golflengtegebied en wordt gemeten hoeveel van het licht bij een bepaalde golflengte, vaak uitgedrukt in het golfgetal, door het monster wordt opgenomen (geabsorbeerd). Dit wordt uitgezet in een spectrum (zie figuur 10).



Figuur 10 Een infraroodspectrum met op de horizontale as het golfgetal en op de verticale as een relatieve maat voor de hoeveelheid licht dat niet door het gemeten sample is gegaan.

De absorptie van infraroodlicht door stoffen is gekoppeld aan bewegingen in de chemische bindingen in de moleculen. Een infraroodspectrum geeft dus informatie over de bindingen in de aanwezige stoffen en daarmee informatie over de chemische opbouw van de stof. De voornaamste beperking hierbij, is dat er geen scheidingsstap aan vooraf gaat, zoals bij de chromatografische technieken. Het spectrum geeft dus informatie over alle aanwezige stoffen tegelijk, en voornamelijk van de stof(fen) met de grootste hoeveelheid in het mengsel. Hierdoor is het indicatief voor de globale chemische samenstelling. Hoe zuiverder de stof, hoe beter de indicatie. De verkregen infraroodspectra zijn te vergelijken met bibliotheken waarin spectra van heel veel bekende stoffen staan opgeslagen. Op deze manier wordt de indicatie verkregen over de samenstelling, wat, afhankelijk van het onderzoeksmateriaal en de vraag, waar nodig verder richting kan geven aan het onderzoek om de preciezere samenstelling vast te stellen met behulp van chromatografische technieken.

4.4.6 Overige technieken

Wanneer het onderzoek daar om vraagt, kan er ook gebruik gemaakt worden van overige, elders op het NFI beschikbare analysetechnieken. Dit kunnen technieken op basis van de interactie tussen licht of een magnetisch veld en stoffen zijn, zoals Raman spectroscopie of nucleaire magnetische resonantie (NMR) spectroscopie. Dit soort technieken geeft ook informatie over de chemische opbouw van de moleculen waar de stoffen uit bestaan. Ook kunnen technieken worden ingezet die informatie geven over de elementsamenstelling en/of kristalstructuur van stoffen, zoals inductief gekoppelde plasma-massaspectrometrie (ICP-MS), scanning elektronenmicroscopie met energie-dispersieve röntgenspectrometrie (SEM-EDX), X-ray fluorescentie (XRF) en X-ray diffractie (XRD). Al

dan niet in combinatie met de chromatografische analyses levert dit voor een grote verscheidenheid aan vragen en stoffen ruim voldoende informatie op in het kader van identificaties en vergelijkingen.

4.4.7 Kwalitatief en kwantitatief onderzoek

De onderzoeksvragen bij het chemisch identificatie onderzoek zijn vrijwel altijd kwalitatief van aard. Dat wil zeggen dat het gaat om het identificeren van stoffen en producten waar de stoffen toe behoren en deze eventueel vergelijken. Hierbij worden normaal gesproken geen hoeveelheden bepaald. Dit is met name omdat zulk kwantitatief onderzoek in de zaken voor het chemisch identificatie onderzoek meestal geen meerwaarde heeft, omdat er te weinig duidelijkheid bestaat over de mate van blootstelling aan een bepaalde stof of specifiek product. Toxicologisch onderzoek naar hoeveelheden in het lichaam geeft in zulke gevallen meestal een veel beter beeld van de mate van blootstelling. Voor het chemisch identificatie onderzoek volstaat veelal het bepalen van de identiteit van de stof.

Wanneer in speciale gevallen wel een indicatie van een concentratie gewenst is, wordt standaard gebruik gemaakt van een controleoplossing, waar de te kwantificeren stof van interesse in bekende concentratie in zit. De toegepaste methodiek is dan op basis van een éénpuntskalibratie, waarbij de concentratie bepaald wordt op basis van de verhouding van de grootte van het signaal van de stof in het chromatogram van het monster, tot het gemeten signaal van diezelfde stof met bekende concentratie in de controleoplossing. Dit levert een goede inschatting van de concentratie op, wat meestal volstaat. Wanneer van daadwerkelijke meerwaarde voor de zaak, is op verzoek een meer precieze bepaling van de concentratie vaak ook mogelijk, al komt dit zelden voor.

5 Interpretatie en conclusie

Op basis van de vraagstelling, de stof(fen) van interesse en het soort stuk van overtuiging worden al dan niet een extractie en een of meer van de beschreven technieken ingezet. Voor identificaties is de identiteit van een stof of combinatie van stoffen leidend voor de beantwoording van de onderzoeksvraag. De overtuigende identiteit van aanwezige stoffen wordt wanneer mogelijk bepaald op basis van het massaspectrum, in combinatie met de retentietijd van de chromatografische techniek. In veel gevallen is de achterliggende vraag niet een vraag naar alleen de identiteit van de stof(fen), maar gaat het om het vaststellen van de aanwezigheid van een specifiek product, bijvoorbeeld een traanverwekkend middel of een specifiek schoonmaakmiddel. Deze bestaan meestal uit veel verschillende ingrediënten, waardoor de combinatie van de geïdentificeerde stoffen bepalend is. Om vanuit de identiteit van een stof of combinatie van stoffen de vraag over een stuk van overtuiging te beantwoorden is dan ook kennis van producten, gebruik van literatuur en het meten van en vergelijken met referenties nodig. Chromatografische piekenpatronen, infraroodspectra of elementsamenstellingen kunnen hieraan bijdragen. Voor zover overtuigend, zal de identiteit en/of mogelijke herkomst worden gerapporteerd. Bij twijfel zal de mate van twijfel en

zullen alternatieve mogelijkheden worden benoemd en toegelicht. Onzekerheid kan bijvoorbeeld ontstaan doordat veel stoffen in veel verschillende producten worden toegepast. Hierdoor kan het voorkomen dat de aangetoonde stoffen wel een richting geven voor een bepaald soort product, maar niet kenmerkend genoeg zijn voor een specifiek product. Denk hierbij bijvoorbeeld aan schoonmaak- of voedingsmiddelen. Hier zitten vaak stoffen in die ook in veel andere schoonmaak- of voedingsmiddelen zitten, waardoor wel duidelijk kan worden dat het om een dergelijk product gaat, maar zonder vergelijking met een referentie dit niet te specificeren is tot een concreet merk of type.

Bij een vergelijkingsvraag worden de aanwezige stoffen die vergeleken moeten worden in beide stukken van overtuiging op identieke wijze geanalyseerd. Er wordt dan gekeken naar de identiteit van de aanwezige stoffen en de eventuele onderlinge concentratieverhouding, op basis van het chromatografische piekenpatroon en de massaspectra. Hier kan het van belang zijn waar de stukken van overtuiging vandaan komen, hoe ze zijn veiliggesteld en waar ze eventueel aan hebben bloot gestaan. Dit zou immers mogelijke ontstane verschillen kunnen verklaren tussen twee producten die ooit van gelijke samenstelling waren en moet mee worden genomen bij de vergelijkingsvraag. Daarnaast moet beoordeeld worden hoe kenmerkend eventuele gevonden overeenkomsten zijn. Daarvoor kan het nodig zijn om soortgelijke producten als referentiemateriaal op dezelfde manier te onderzoeken en te vergelijken. Om de resultaten te duiden worden ze doorgaans gewogen in het licht van twee elkaar uitsluitende hypothesen. Idealiter worden scenario's door de opdrachtgever en/of aanvrager en de verdediging geschetst, zodat de deskundigen van het NFI bijpassende hypothesen kunnen formuleren. De eerste hypothese is dan veelal de hypothese die uitgaat van gelijke herkomst van spoor en referentie. De alternatieve hypothese is dan afhankelijk van een alternatief scenario binnen de zaak. Hierbij gaat het niet om een alternatieve hypothese die alleen uitgaat van een willekeurige andere herkomst, maar van een herkomst van een alternatieve populatie producten, passend bij het alternatieve scenario. De keuze voor de gedetailleerdheid van deze alternatieve populatie bepaald de omvang ervan, wat invloed heeft op de bewijskracht van de vergelijking. Bij de rapportage zal dan middels verbale waarschijnlijkheidstermen⁴ een uitspraak worden gedaan over hoeveel steun de resultaten van het onderzoek geven aan de ene of de andere hypothese.

Soms worden in aanvragen voor het chemisch identificatie onderzoek ook vragen van medische of toxicologische aard gesteld bij de vraag naar de identiteit van een stof of product. Dit kan bijvoorbeeld gaan om vragen over de medische gevolgen bij het in contact komen van delen van het menselijk lichaam met die stof of wat de invloed van inname van een stof is door mens of dier. Dit soort vragen vallen buiten het expertisegebied van het chemisch identificatie onderzoek en kunnen daarom niet door deskundigen chemisch identificatie onderzoek worden beantwoord. Bij dergelijke

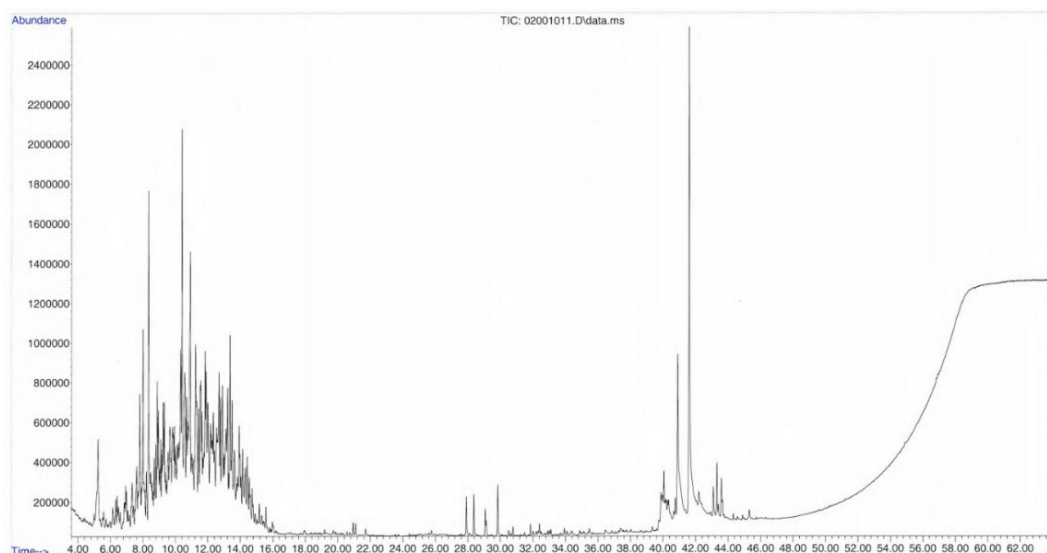
⁴ <https://www.forensischinstituut.nl/vakbijlage/waarschijnlijkheidstermen>

vragen wordt geadviseerd om een (forensisch) toxicoloog of (dieren)geneeskundige te raadplegen. Het NFI kan via de Frontdesk indien nodig assisteren bij de aanvraag en passende productcodes.

6 Aandachtspunten bij insturen stukken van overtuiging

De analysetechnieken die bij het chemisch identificatie onderzoek worden gebruikt zijn heel erg gevoelig. Het positieve gevolg hiervan is dat ook heel kleine hoeveelheden goed gemeten kunnen worden. Tegelijk is de keerzijde dat er ook veel stoffen gezien worden die afkomstig zijn van bijvoorbeeld de ondergrond waar het stuk van overtuiging van is veiliggesteld of van het materiaal waar een vlek op zit: dit wordt de matrix genoemd. Om deze reden wordt er waar mogelijk ook altijd een blanco meting gedaan van een, ogenschijnlijk, schoon deel van de matrix om te kunnen bepalen wat daadwerkelijk van de relevante stof komt en wat van de matrix.

Wanneer iets wordt veiliggesteld van de plaats delict is de wijze waarop dit wordt gedaan natuurlijk van groot belang. Dit geldt ook voor de kansrijkheid van het chemische onderzoek. Veel bemonsteringsmaterialen zijn vaak wel steriel of zelfs DNA-vrij, maar chemisch gezien zijn deze meestal niet 'schoon'. Denk hierbij aan bijvoorbeeld een gaasje, een vochtig doekje of een wattenstaafje. Dit soort bemonsteringsmateriaal bevat veel storende stoffen die bij de extractie ook in oplossing komen en zo de analyse op de relevante stoffen bemoeilijken. Voor het chemisch onderzoek is het dus van belang om zo schoon mogelijk bemonsterings- en verpakkingsmateriaal te gebruiken. Dit kan, afhankelijk van de situatie op de plaats delict, door bijvoorbeeld een heel stuk met ondergrond veilig te stellen en niet alleen de vlek of vloeistof te bemonsteren. Bij vloeistoffen wordt waar mogelijk bij voorkeur een beetje van de vloeistof zelf in een afgesloten flesje ontvangen, bijvoorbeeld opgezogen met een pipetje. Of, wanneer dit niet mogelijk is, door gebruik te maken van droog bemonsteringsmateriaal als spateltjes voor vaste stoffen of filtreerpapiermpjes om een vloeistof op te deppen. Dit kan van grote invloed zijn op het succes van het onderzoek. In het geval er gebruik wordt gemaakt van bemonsteringsmateriaal is het voor de interpretatie in elke situatie van groot belang een blanco van hetzelfde bemonsteringsmateriaal mee te sturen bij de aanvraag en eventueel een monster van de ondergrond zonder de stof van interesse. Hiermee kan de chemische achtergrond in kaart worden gebracht, om zo gericht de stoffen te isoleren die daadwerkelijk afkomstig zijn van het betwiste materiaal (zie figuur 11). Als het gewenste onderzoek gaat om vluchtige stoffen is het van belang de stoffen zo snel mogelijk luchtdicht te verpakken in een brandpot of brandzak.



Figuur 11 Het GC-chromatogram van een extract van een blanco nylon-flocked swab die onder meer bij zedenbemonsteringen wordt gebruikt, met allemaal stoffen die uit het bemonsteringsmateriaal zelf komen.

Bij een aanvraag met betrekking tot het identificeren van specifieke stoffen op bijvoorbeeld kleding of andere grotere voorwerpen is het in het belang van het onderzoek te schetsen waar op basis van het ter zake doende scenario de kans het grootst is de stoffen aan te treffen. Soms kan op basis van visuele waarnemingen gelokaliseerd worden waar op het voorwerp iets relevants aanwezig is, maar dat kan lang niet altijd. In die gevallen moet er een groter oppervlak van het voorwerp bemonsterd worden. Echter hoe groter het oppervlak wat uiteindelijk geëxtraheerd moet worden, hoe meer storende componenten van de ondergrond meekomen en hoe lager de concentratie van de stoffen van interesse wordt. Gericht zoeken kan hierom de kans op het aantreffen van specifieke sporen sterk vergroten. Enige achtergrondinformatie over wat er gebeurd zou zijn is dan ook heel zinvol, omdat het kan bijdragen aan een gerichtere bemonstering. Daarbij geeft ook het formuleren van specifieke onderzoeksvragen een duidelijkere focus voor het onderzoek. Overleg hierover met een van de deskundigen chemisch identificatie onderzoek van het NFI is altijd mogelijk, telefonisch of via email. Door in goed overleg de best passende vraag te formuleren kan het onderzoek gericht(er) ingezet worden en kan het NFI de opdrachtgever en aanvrager beter van dienst zijn bij het beantwoorden van waar men daadwerkelijk antwoord op wenst. Ook kan dan in vroeg stadium worden meegedacht over of een gewenste vraag al dan niet kansrijk is of wellicht helemaal niet beantwoord kan worden en kan worden aangegeven wat eventueel wel mogelijk en relevant is voor de zaak. De deskundigen chemisch identificatie onderzoek denken graag mee.

7 Kwaliteitsborging

Om de kwaliteit van de werkzaamheden te garanderen wordt de kwaliteit op meerdere manieren geborgd. Analysesystemen worden gevalideerd, bij analyses worden controlemonsters en blanco's meegenomen ter controle van het analysesysteem en de gebruikte materialen en chemicaliën. Identificaties worden zoveel mogelijk gedaan door vergelijking met internationaal gecontroleerde en

geaccepteerde databases en waar mogelijk met mee geanalyseerde referenties. Er wordt volgens NFI-protocol gebruik gemaakt van het vier ogen principe bij de intake van de zaak, de uitwerking van de analyseresultaten en de rapporten. Voor de duiding van analyseresultaten en de interpretatie ervan wordt ook de wetenschappelijke literatuur gebruikt. Alle rapporterende deskundigen hebben met succes het NFI-examen doorlopen en worden periodiek aan een hercertificering onderworpen.

Als onderdeel van het kwaliteitssysteem van het NFI worden procedures regelmatig beoordeeld met zowel interne (door het NFI zelf) als externe (door de Raad van Accreditatie) audits. Ook wordt regelmatig deelgenomen aan (internationale) ringonderzoeken, waarbij meerdere deelnemende laboratoria van een organiserend instantie hetzelfde onderzoeksmateriaal krijgen aangeboden met dezelfde vraagstelling. Nadat de deelnemende laboratoria hun onderzoeksresultaten hebben doorgegeven wordt aan deze laboratoria bekend gemaakt wat de organisator had opgestuurd en wat dus de resultaten hadden moeten zijn. Door deze te vergelijken met de eigen resultaten wordt inzicht verkregen in de betrouwbaarheid van het uitgevoerde onderzoek. Elk ringonderzoek wordt in detail geëvalueerd.

8 Afkortingenlijst

CIO	Chemisch Identificatie Onderzoek
FID	Vlamionisatiedetector / Vlamionisatiedetectie
(FT)IR	(Fourier getransformeerde) Infrarood spectrometer / Infrarood spectroscopie
GC	Gaschromatograaf / Gaschromatografie
HRMS	Hoge resolutie massaspectrometer / Hoge resolutie massaspectrometrie
HS	Headspace
IC	Ionchromatograaf / Ionchromatografie
LC	Vloeistofchromatograaf / Vloeistofchromatografie
m/z	Massa - ladingverhouding
MEP	Materialen en Producten
MS	Massaspectrometer / Massaspectrometrie
NFI	Nederlands Forensisch Instituut.
PDA	Fotodiodearray detector / Fotodiodearray detectie
pH	Maat voor de zuurgraad van een waterige oplossing
TCD	Thermische geleidbaarheidsdetector / Thermische geleidbaarheidsdetectie

9 Meer weten?

Voor de lezer die na het lezen van deze vakbijlage meer wil weten over dit vakgebied:

1. Achtergrondverhaal: Vreemde vlekken of gekke geurtjes? Chemisch Identificatie Onderzoek zoekt uit wat het is!
<https://www.forensischinstituut.nl/achtergrondverhaal/vreemde-vlekken-gekke-geurtjes-chemisch-identificatie-onderzoek-zoekt-uit-wat>
2. Chemisch onderzoek aan materialen en producten
<https://www.forensischinstituut.nl/forensisch-onderzoek/chemisch-onderzoek-aan-materialen-en-producten>
3. Informatieblad Chemisch onderzoek naar glymmiddel bij seksuele misdrijven
<https://www.forensischinstituut.nl/informatieblad/chemisch-onderzoek-naar-glymmiddel-bij-seksuele-misdrijven>
4. Themasessie (op locatie): Materialen en Producten (chemische identificaties)
<https://www.forensischinstituut.nl/trainingen-cursussen/themasessies/materialen-en-producten-chemische-identificaties>



Chemisch identificatie onderzoek, op zoek naar stoffen en hun betekenis.

Voor algemene vragen kunt u contact opnemen met de Frontdesk, telefoon (070) 888 68 88.
Voor inhoudelijke vragen kunt u contact opnemen met het onderzoeksgebied Chemisch
Identificatie Onderzoek van de Divisie Chemische en Fysische Sporen, telefoon (070) 888 6942.

Nederlands Forensisch Instituut
Ministerie van Justitie en Veiligheid
Postbus 24044 | 2490 AA Den Haag

Telefoon (070) 888 66 66
www.forensischinstituut.nl