

DIN EN 16694



ICS 13.060.50

**Wasserbeschaffenheit –
Bestimmung von ausgewählten polybromierten Diphenylethern (PBDE) in
Gesamtwasserproben –
Verfahren mittels Festphasenextraktion (SPE) mit SPE-Disks in
Verbindung mit Gaschromatographie-Massenspektrometrie (GC-MS);
Deutsche Fassung EN 16694:2015**

Water quality –

Determination of selected polybrominated diphenyl ether (PBDE) in whole water samples –
Method using solid phase extraction (SPE) with SPE-disks combined with
gas chromatography-mass spectrometry (GC-MS);
German version EN 16694:2015

Qualité de l'eau –

Dosage d'une sélection d'éthers diphenyliques polybromés (PBDE) dans des échantillons
d'eau totale –
Méthode par extraction en phase solide (SPE) avec disques SPE, avec couplage
chromatographie en phase gazeuse-spectrométrie de masse (CG-SM);
Version allemande EN 16694:2015

Gesamtumfang 34 Seiten

DIN-Normenausschuss Wasserwesen (NAW)

Nationales Vorwort

Dieses Dokument (EN 16694:2015) wurde vom Technischen Komitee CEN/TC 230 „Wasseranalytik“ erarbeitet, dessen Sekretariat vom DIN (Deutschland) gehalten wird.

Das zuständige deutsche Gremium ist der Unterausschuss NA 119-01-03-02 UA „Organische Verbindungen“ des Arbeitsausschusses NA 119-01-03 AA „Wasseruntersuchung“ im DIN-Normenausschuss Wasserwesen (NAW).

Bezeichnung des Verfahrens:

Bestimmung von ausgewählten polybromierten Diphenylethern (PBDE) in Gesamtwasserproben — Verfahren mittels Festphasenextraktion (SPE) mit SPE-Disks in Verbindung mit Gaschromatographie-Massen-spektrometrie (GC-MS):

Verfahren DIN EN 16694 — F 48

Diese Norm wurde unter dem Mandat M/424 erarbeitet, das die Europäische Kommission dem Europäischen Komitee für Normung (CEN) erteilt hat, um genormte Verfahren zur Unterstützung der EU-Wasserrahmenrichtlinie (2000/60/EG) zu entwickeln oder zu verbessern. Das in dieser Norm festgelegte Verfahren unterstützt die im Anhang X der Wasserrahmenrichtlinie festgelegten Anforderungen.

Für die in diesem Dokument zitierten Internationalen Normen wird im Folgenden auf die entsprechenden Deutschen Normen hingewiesen:

ISO 5725-2 siehe DIN ISO 5725-2

Es ist erforderlich, bei den Untersuchungen nach dieser Norm Fachleute oder Facheinrichtungen einzuschalten und bestehende Sicherheitsvorschriften zu beachten.

Bei Anwendung der Norm ist im Einzelfall je nach Aufgabenstellung zu prüfen, ob und inwieweit die Festlegung von zusätzlichen Randbedingungen erforderlich ist.

Die vorliegende Norm enthält das vom DIN-Normenausschuss Wasserwesen (NAW) und von der Wasserchemischen Gesellschaft – eine Fachgruppe in der Gesellschaft Deutscher Chemiker – gemeinsam erarbeitete Deutsche Einheitsverfahren zur Wasser-, Abwasser- und Schlammuntersuchung:

Bestimmung von ausgewählten polybromierten Diphenylethern (PBDE) in Gesamtwasserproben —
Verfahren mittels Festphasenextraktion (SPE) mit SPE-Disks in Verbindung mit
Gaschromatographie-Massenspektrometrie (GC-MS) (F 48).

Die als DIN-Normen veröffentlichten Deutschen Einheitsverfahren sind bei der Beuth Verlag GmbH einzeln oder zusammengefasst erhältlich. Außerdem werden die genormten Deutschen Einheitsverfahren in der Loseblattsammlung „Deutsche Einheitsverfahren zur Wasser-, Abwasser- und Schlammuntersuchung“ gemeinsam von der Beuth Verlag GmbH und der Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA publiziert.

Normen oder Norm-Entwürfe mit dem Gruppentitel „*Deutsche Einheitsverfahren zur Wasser-, Abwasser- und Schlammuntersuchung*“ sind in folgende Gebiete (Haupttitel) aufgeteilt:

Allgemeine Angaben (Gruppe A)

Sensorische Verfahren (Gruppe B)

Physikalische und physikalisch-chemische Kenngrößen (Gruppe C)

Anionen (Gruppe D)

Kationen (Gruppe E)

Gemeinsam erfassbare Stoffgruppen (Gruppe F)

Gasförmige Bestandteile (Gruppe G)

Summarische Wirkungs- und Stoffkenngrößen (Gruppe H)

Mikrobiologische Verfahren (Gruppe K)

Testverfahren mit Wasserorganismen (Gruppe L)

Biologisch-ökologische Gewässeruntersuchung (Gruppe M)

Einzelkomponenten (Gruppe P)

Schlamm und Sedimente (Gruppe S)

Suborganismische Testverfahren (Gruppe T)

Über die bisher erschienenen Teile dieser Normen gibt die Geschäftsstelle des Normenausschusses Wasserwesen (NAW) im DIN Deutsches Institut für Normung e.V., Telefon 030 2601-2448, oder die Beuth Verlag GmbH, 10772 Berlin (Hausanschrift: Am DIN-Platz, Burggrafenstr. 6, 10787 Berlin), Auskunft.

Nationaler Anhang NA (informativ)

Literaturhinweise

DIN ISO 5725-2, *Genauigkeit (Richtigkeit und Präzision) von Messverfahren und Messergebnissen — Teil 2: Grundlegende Methode für Ermittlung der Wiederhol- und Vergleichpräzision eines vereinheitlichten Messverfahrens*

Deutsche Fassung

Wasserbeschaffenheit —
Bestimmung von ausgewählten polybromierten
Diphenylethern (PBDE) in Gesamtwasserproben —
Verfahren mittels Festphasenextraktion (SPE) mit SPE-Disks
in Verbindung mit Gaschromatographie-Massenspektrometrie
(GC-MS)

Water quality —
Determination of selected polybrominated diphenyl
ether (PBDE) in whole water samples —
Method using solid phase extraction (SPE) with
SPE-disks combined with gas chromatography-mass
spectrometry (GC-MS)

Qualité de l'eau —
Dosage du pentabromodiphényléther (PBDE) dans des
échantillons d'eau totale —
Méthode par extraction en phase solide (SPE) avec
disques SPE, avec couplage chromatographie en phase
gazeuse-spectrométrie de masse (CG-SM)

Diese Europäische Norm wurde vom CEN am 27. Juni 2015 angenommen.

Die CEN-Mitglieder sind gehalten, die CEN/CENELEC-Geschäftsordnung zu erfüllen, in der die Bedingungen festgelegt sind, unter denen dieser Europäischen Norm ohne jede Änderung der Status einer nationalen Norm zu geben ist. Auf dem letzten Stand befindliche Listen dieser nationalen Normen mit ihren bibliographischen Angaben sind beim Management-Zentrum des CEN-CENELEC oder bei jedem CEN-Mitglied auf Anfrage erhältlich.

Diese Europäische Norm besteht in drei offiziellen Fassungen (Deutsch, Englisch, Französisch). Eine Fassung in einer anderen Sprache, die von einem CEN-Mitglied in eigener Verantwortung durch Übersetzung in seine Landessprache gemacht und dem Management-Zentrum mitgeteilt worden ist, hat den gleichen Status wie die offiziellen Fassungen.

CEN-Mitglieder sind die nationalen Normungsinstitute von Belgien, Bulgarien, Dänemark, Deutschland, der ehemaligen jugoslawischen Republik Mazedonien, Estland, Finnland, Frankreich, Griechenland, Irland, Island, Italien, Kroatien, Lettland, Litauen, Luxemburg, Malta, den Niederlanden, Norwegen, Österreich, Polen, Portugal, Rumänien, Schweden, der Schweiz, der Slowakei, Slowenien, Spanien, der Tschechischen Republik, der Türkei, Ungarn, dem Vereinigten Königreich und Zypern.



EUROPÄISCHES KOMITEE FÜR NORMUNG
EUROPEAN COMMITTEE FOR STANDARDIZATION
COMITÉ EUROPÉEN DE NORMALISATION

CEN-CENELEC Management-Zentrum: Avenue Marnix 17, B-1000 Brüssel

Inhalt

	Seite
Europäisches Vorwort	3
Einleitung	4
1 Anwendungsbereich.....	5
2 Normative Verweisungen	5
3 Grundlage des Verfahrens.....	6
4 Störungen	6
4.1 Störungen bei Extraktion und Clean-up	6
4.2 Störungen bei GC-MS	6
5 Reagenzien.....	6
6 Geräte.....	9
7 Probenahme	10
8 Durchführung.....	10
8.1 Probenvorbereitung.....	10
8.2 Extraktion mittels SPE-Disks.....	10
8.3 Einengung des Lösemittels.....	11
8.4 Gaschromatographie und Massenspektrometrie	11
8.5 Identifizierung einzelner Verbindungen mittels GC-MS	12
8.6 Blindwertmessung	13
9 Kalibrierung	14
9.1 Kalibrierung mit internen Standards.....	14
9.2 Durchführung.....	14
9.2.1 Ermittlung des Geltungsbereiches des linearen Zusammenhangs	14
9.2.2 Zwei-Punkte-Kalibrierung über den gesamten linearen Bereich	14
9.2.3 Schätzung der Genauigkeit der Kalibrierung für die betrachtete Konzentration.....	15
10 Quantitative Bestimmung.....	16
10.1 Bestimmung der BDE-Konzentrationen in Gesamtwasserproben.....	16
10.2 Bestimmung der Wiederfindungsraten der internen Standards.....	17
11 Angabe der Ergebnisse	17
12 Analysenbericht	18
Anhang A (informativ) Geeignete Bedingungen für die Gaschromatographie und Beispiel- Chromatogramme	19
A.1 GC-HRMS-Bedingungen für die Chromatogramme in Bild A.1.....	19
A.2 GC-MS/MS-Bedingungen für die Chromatogramme in Bild A.2.....	22
A.3 GC-NCI-MS-Bedingungen für das Chromatogramm in Bild A.3	24
Anhang B (informativ) Daten zur Wiederhol- und Vergleichpräzision.....	25
Anhang C (informativ) Beispiele für geeignete Festphasenextraktions-Scheiben.....	28
Anhang D (informativ) Clean-up-Verfahren	29
D.1 Reagenzien.....	29
D.2 Durchführung.....	29
Literaturhinweise.....	30

Europäisches Vorwort

Dieses Dokument (EN 16694:2015) wurde vom Technischen Komitee CEN/TC 230 „Wasseranalytik“ erarbeitet, dessen Sekretariat vom DIN gehalten wird.

Diese Europäische Norm muss den Status einer nationalen Norm erhalten, entweder durch Veröffentlichung eines identischen Textes oder durch Anerkennung bis März 2016, und etwaige entgegenstehende nationale Normen müssen bis März 2016 zurückgezogen werden.

Dieses Dokument wurde unter einem Mandat erarbeitet, das die Europäische Kommission und die Europäische Freihandelszone dem CEN erteilt haben.

Es wird auf die Möglichkeit hingewiesen, dass einige Elemente dieses Dokuments Patentrechte berühren können. CEN [und/oder CENELEC] sind nicht dafür verantwortlich, einige oder alle diesbezüglichen Patentrechte zu identifizieren.

Entsprechend der CEN-CENELEC-Geschäftsordnung sind die nationalen Normungsinstitute der folgenden Länder gehalten, diese Europäische Norm zu übernehmen: Belgien, Bulgarien, Dänemark, Deutschland, die ehemalige jugoslawische Republik Mazedonien, Estland, Finnland, Frankreich, Griechenland, Irland, Island, Italien, Kroatien, Lettland, Litauen, Luxemburg, Malta, Niederlande, Norwegen, Österreich, Polen, Portugal, Rumänien, Schweden, Schweiz, Slowakei, Slowenien, Spanien, Tschechische Republik, Türkei, Ungarn, Vereinigtes Königreich und Zypern.

Einleitung

WARNUNG — Anwender dieser Europäischen Norm sollten mit der üblichen Laborpraxis vertraut sein. Diese Europäische Norm gibt nicht vor, alle unter Umständen mit der Anwendung des Verfahrens verbundenen Sicherheitsaspekte anzusprechen. Es liegt in der Verantwortung des Arbeitgebers, angemessene Sicherheits- und Schutzmaßnahmen zu treffen und sicherzustellen, dass diese mit nationalen Festlegungen übereinstimmen.

WICHTIG — Es ist unbedingt erforderlich, bei den Untersuchungen nach dieser Europäischen Norm Fachleute oder Facheinrichtungen einzuschalten.

Polybromierte Diphenylether (PBDE) sind in Anhang X der EU-Wasserrahmenrichtlinie (WRRL, Richtlinie 2000/60/EG) angeführte prioritäre Stoffe, für die auf EU-Ebene Umweltqualitätsnormen (UQN) für Binnenoberflächengewässer sowie andere Oberflächengewässer erstellt wurden, um die aquatische Umwelt gegen chemische Verschmutzung zu schützen (Richtlinie 2008/105/EG). Mit Ausnahme von Metallen werden die UQS als Gesamtkonzentrationen in der Gesamtwasserprobe angegeben. Des Weiteren müssen die bei der WRRL-Überwachung angewendeten Analysenverfahren bestimmte Anforderungen hinsichtlich der Mindest-Bestimmungsgrenze und der höchstzulässigen Messunsicherheit erfüllen (Richtlinie 2009/90/EG). Für die Bestimmung von PBDE in Gesamtwasserproben gibt es bisher kein genormtes Verfahren, das diese Anforderungen erfüllt. Daher hat die Europäische Kommission dem CEN ein Mandat erteilt, Normen zur Unterstützung der Umsetzung der Überwachungsanforderungen der WRRL zu erarbeiten oder zu verbessern.

Richtlinie 2008/105/EG wurde durch Richtlinie 2013/39/EU geändert, diese Norm wurde jedoch zur Bestimmung von PBDE auf Grundlage des Anhangs A der Richtlinie 2008/105/EG erarbeitet.

Zu der im Anhang X der WRRL angeführten Liste prioritärer Stoffe gehört technischer Pentabromdiphenylether, der als ein Gemisch der Kongenere BDE-28, BDE-47, BDE-99, BDE-100, BDE-153 und BDE-154 betrachtet wird. Der jährliche Durchschnittswert der Umweltqualitätsnorm (JD-UQN) für Pentabromdiphenylether in Binnenoberflächengewässern beträgt 0,5 ng/l und ist für die Konzentration in Gesamtwasserproben, einschließlich der in der Probe enthaltenen Schwebstoffe (SPM, en: suspended particulate matter), festgelegt. PBDE-Verbindungen adsorbieren stark an Feststoffen in der Umwelt. Die an Partikel gebundene Fraktion kann einen wesentlichen Anteil der Gesamtkonzentration darstellen. Das Ziel des Verfahrens ist es, Gesamtwasserproben in einem Arbeitsschritt zu extrahieren, um sowohl die gelöste als auch die partikelgebundene PBDE-Fraktion bestimmen zu können. Die qualitative und quantitative Bestimmung von BDE-Kongeneren im spurenanalytischen Konzentrationsbereich erfordert hochempfindliche Chromatographiegeräte und wirksame Anreicherungs-schritte sowie Kenntnis des potentiellen Einflusses von Blindwerten.

1 Anwendungsbereich

Diese Europäische Norm legt ein Verfahren für die Bestimmung von sechs ausgewählten polybromierten Diphenylethern (PBDE), wie in Tabelle 1 angegeben und repräsentativ für technische bromierte Diphenylether, in Wasserproben mit Massenkonzentrationen von $\geq 0,025$ ng/l für jedes einzelne Kongener fest. Das Verfahren nutzt die Festphasenextraktion mit Extraktions-Scheiben (SPE-Disk, en: solid-phase extraction disk) in Kombination mit Gaschromatographie-Massenspektrometrie (GC-MS). Es gilt für die Analyse von PBDE in Oberflächenwasser mit einem Schwebstoffanteil bis zu 500 mg/l (Gesamtwasserproben), Trinkwasser und Grundwasser. Die Bestimmungsgrenze (BG) wurde nach ISO/TS 13530 auf Grundlage von Mehrfachbestimmungen von Blindwertproben unter wiederholbaren Bedingungen bestimmt.

Dieses Verfahren darf für die Analyse weiterer BDE-Kongener, die nicht in Tabelle 1 angegeben sind, oder andere Arten von Wasser angewendet werden, dies muss jedoch vorher verifiziert werden.

Tabelle 1 — Nach diesem Verfahren bestimmte polybromierte Diphenylether (PBDE)

Kongener	Abkürzung ^a	Summenformel	Molare Masse g/mol	CAS-RN ^b
2,4,4'-Tribromdiphenylether	BDE-28	C ₁₂ H ₇ Br ₃ O	406,895 4	41318-75-6
2,2',4,4'-Tetrabromdiphenylether	BDE-47	C ₁₂ H ₆ Br ₄ O	485,795 0	5436-43-1
2,2',4,4',5-Pentabromdiphenylether	BDE-99	C ₁₂ H ₅ Br ₅ O	564,691 1	60348-60-9
2,2',4,4',6-Pentabromdiphenylether	BDE-100	C ₁₂ H ₅ Br ₅ O	564,691 1	189084-64-8
2,2',4,4',5,6'-Hexabromdiphenylether	BDE-154	C ₁₂ H ₄ Br ₆ O	643,587 2	68631-49-2
2,2',4,4',5,5'-Hexabromdiphenylether	BDE-153	C ₁₂ H ₄ Br ₆ O	643,587 2	207122-15-4
ANMERKUNG EG-Nummern gelten nicht für einzelne BDE-Kongener.				
^a Nummerierung analog der IUPAC-Nomenklatur für PCB.				
^b CAS-RN: Chemical Abstracts Service Registry Number				

2 Normative Verweisungen

Die folgenden Dokumente, die in diesem Dokument teilweise oder als Ganzes zitiert werden, sind für die Anwendung dieses Dokuments erforderlich. Bei datierten Verweisungen gilt nur die in Bezug genommene Ausgabe. Bei undatierten Verweisungen gilt die letzte Ausgabe des in Bezug genommenen Dokuments (einschließlich aller Änderungen).

EN ISO 3696, *Wasser für analytische Laborzwecke — Spezifikation und Prüfverfahren (ISO 3696)*

EN ISO 5667-1, *Wasserbeschaffenheit — Probenahme — Teil 1: Anleitung zur Erstellung von Probenahmeprogrammen und Probenahmetechniken (ISO 5667-1)*

EN ISO 5667-3, *Wasserbeschaffenheit — Probenahme — Teil 3: Konservierung und Handhabung von Wasserproben (ISO 5667-3)*

ISO 8466-1, *Water quality — Calibration and evaluation of analytical methods and estimation of performance characteristics — Part 1: Statistical evaluation of the linear calibration function*

3 Grundlage des Verfahrens

Ein Gemisch geeigneter interner Standards ($^{13}\text{C}_{12}$ -markierte BDE oder fluoridierte BDE) wird zu einem Liter einer Wasserprobe hinzugefügt und die in der wässrigen Probe vorliegenden PBDE anschließend mittels einer Festphasenextraktions-Scheibe (SPE-Disk) extrahiert. Die SPE-Disk wird mit einem geeigneten Lösemittel (5.4) oder Lösemittelgemisch eluiert und der erhaltene Extrakt wird für die Analyse oder für eine weitere Aufreinigung (Clean-up) eingeengt.

Vor der Injektion wird der Extrakt mit einem Injektionsstandard versetzt und ein Aliquot davon wird in den Gaschromatographen eingespritzt. Die Analyten werden mittels Kapillar-Gaschromatographie getrennt und durch hochauflösende Massenspektrometrie mit Elektronenstoß-Ionisation (EI-HRMS), durch niedrigauflösende Massenspektrometrie nach negativer chemischer Ionisierung (NCI-MS) oder durch niedrigauflösende Tandemmassenspektrometrie (MS/MS) qualitativ und quantitativ bestimmt. Bei den beiden letztgenannten Verfahren kann ein Clean-up-Schritt z. B. mittels Mehrschicht-Kieselgelsäule, und/oder das Entfernen von Schwefel, z. B. mittels Gelpermeationschromatographie, notwendig sein.

4 Störungen

4.1 Störungen bei Extraktion und Clean-up

Zur Vermeidung von Störungen, sind die Proben entsprechend den Festlegungen in Abschnitt 7 zu nehmen.

Die unterschiedlichen im Handel erhältlichen SPE-Disks können Qualitätsunterschiede aufweisen. Von Charge zu Charge können Schwankungen in der Selektivität der Materialien auftreten, sodass unter Umständen signifikant abweichende Extraktionsausbeuten erhalten werden. Dies beeinträchtigt prinzipiell nicht deren Eignung, abgesehen von einer daraus resultierenden etwaigen höheren Bestimmungsgrenze für einzelne Stoffe. Um eine hohe Genauigkeit und Präzision der Analyseergebnisse sicherzustellen, sind bei der Messung und Kalibrierung Materialien derselben Charge zu verwenden. Bei der Analyse der Proben sind bei den Extraktionszeiten und Elutionsverfahren innerhalb einer Probenserie größere Schwankungen zu vermeiden.

4.2 Störungen bei GC-MS

Störungen können z. B. durch das verwendete Injektionssystem oder durch unzureichende Trennung hervorgerufen werden. Erfahrene Bediener sollten in der Lage sein, diese Art von Störungen zu minimieren. Zur Aufrechterhaltung einer optimalen Leistungsfähigkeit sind die chromatographische und die spektrometrische Einheit des Analysensystems regelmäßig zu überprüfen. Die erforderliche Stabilität des Systems sollte regelmäßig mithilfe eines GC-Messstandards geprüft werden.

5 Reagenzien

Reagenzien dürfen keine Blindwerte bei der GC-MS Bestimmung verursachen.

Lösemittel und Reagenzien von hinreichender Reinheit verwenden, d. h. mit vernachlässigbar geringen Verunreinigungen im Vergleich zur Konzentration der zu bestimmenden Analyten. Als Reagenzien werden, soweit erhältlich, solche des Reinheitsgrades „zur Rückstandsanalyse“, oder besser verwendet, um geringe Blindwerte zu erhalten. Den Blindwerteinfluss regelmäßig durch Messungen prüfen und, soweit erforderlich, zusätzliche Reinigungsschritte durchführen.

5.1 Wasser, Qualität 1 nach ISO 3696 oder gleichwertig.

5.2 Betriebsgase für die Gaschromatographie-Massenspektrometrie, hochrein und nach den Angaben des Geräteherstellers.

5.3 Stickstoff, hochrein, d. h. mindestens 99,996 % (Volumenanteil), zur Aufkonzentrierung durch Eindampfen.

5.4 Lösemittel für Extraktion, Chromatographie und Herstellung der Referenzlösungen.

Abhängig vom Verfahrensschritt und der Verfügbarkeit im Handel erhältlicher Stammlösungen können verschiedene Lösemittel „zur Rückstandsanalyse“ verwendet werden, z. B.

- Toluol, C_7H_8 , (Siedepunkt: 111 °C),
- Aceton, C_3H_6O , (Siedepunkt: 56 °C),
- *iso*- oder *n*-Hexan, C_6H_{14} , (Siedepunkt: 60 °C),
- *iso*-Octan (2,2,4-Trimethylpentan), C_8H_{18} , (Siedepunkt: 99 °C),
- Nonan, C_9H_{20} , (Siedepunkt: 151 °C),
- Dichlormethan, CH_2Cl_2 , (Siedepunkt: 39,7 °C),
- Ethylacetat, $C_4H_8O_2$, (Siedepunkt: 77 °C),
- *iso*-Propanol, C_3H_8O , (Siedepunkt: 82 °C).

Ein geeigneter Keeper wird empfohlen (z. B. Toluol), wenn das Volumen des Lösemittels auf weniger als 0,5 ml eingeengt wird. Für Large-Volume-Injektion sollte ein flüchtiges Lösemittel, z. B. Hexan, verwendet werden.

5.5 Clean-up-Material, nach Anhang C.

5.6 Natriumsulfat, wasserfrei, Na_2SO_4 , Pulver.

5.7 Standards

5.7.1 Referenzstandards

Für die Kalibrierung werden die in Tabelle 1 angeführten PBDE verwendet. Lösungen der Referenzsubstanzen sind im Handel erhältlich.

5.7.2 Interne Standards

Lösungen der Referenzsubstanzen zur Verwendung als interne Standards bei der Elektronenstoß-Ionisation (siehe Tabelle 2) sind im Handel erhältlich.

Tabelle 2 — Beispiele interner Standards für die GC-EI-MS-Analyse

Standard	Abkürzung	Summenformel	Molare Masse g/mol
2,4,4'-Tribrom[$^{13}C_{12}$]diphenylether	^{13}C -BDE-28	$^{13}C_{12}H_7Br_3O$	418,803 8
2,2',4,4'-Tetrabrom[$^{13}C_{12}$]diphenylether	^{13}C -BDE-47	$^{13}C_{12}H_6Br_4O$	497,703 5
2,2',4,4',5-Pentabrom[$^{13}C_{12}$]diphenylether	^{13}C -BDE-99	$^{13}C_{12}H_5Br_5O$	576,599 5
2,2',4,4',5,5'-Hexabrom[$^{13}C_{12}$]diphenylether	^{13}C -BDE-153	$^{13}C_{12}H_4Br_6O$	655,495 5

Lösungen der Referenzsubstanzen zur Verwendung als interne Standards bei der negativen chemischen Ionisierung (siehe Tabelle 3) sind im Handel erhältlich.