

DIN EN ISO 21253-1



ICS 13.060.50

**Wasserbeschaffenheit –
Gemeinsam erfassbare Stoffgruppen –
Teil 1: Kriterien für die Identifizierung von Zielverbindungen mittels
Gaschromatographie und Flüssigchromatographie mit
Massenspektrometrie (ISO 21253-1:2019);
Deutsche Fassung EN ISO 21253-1:2019**

Water quality –
Multi-compound class methods –
Part 1: Criteria for the identification of target compounds by gas and liquid chromatography
and mass spectrometry (ISO 21253-1:2019);
German version EN ISO 21253-1:2019

Qualité de l'eau –
Méthodes d'analyse de composés multi-classes –
Partie 1: Critères pour l'identification des composées cibles par chromatographie en phase
gazeuse et liquide et spectrométrie de masse (ISO 21253-1:2019);
Version allemande EN ISO 21253-1:2019

Gesamtumfang 35 Seiten

DIN-Normenausschuss Wasserwesen (NAW)

Nationales Vorwort

Dieses Dokument (EN ISO 21253-1:2019) wurde vom Technischen Komitee ISO/TC 147 „Water quality“ in Zusammenarbeit mit dem Technischen Komitee CEN/TC 230 „Wasseranalytik“ erarbeitet, dessen Sekretariat von DIN (Deutschland) gehalten wird.

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

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.

DIN EN ISO 21253 besteht unter dem allgemeinen Titel *Wasserbeschaffenheit — Gemeinsam erfassbare Stoffgruppen* aus den folgenden Teilen:

- *Teil 1: Kriterien für die Identifizierung von Zielverbindungen mittels Gaschromatographie und Flüssigchromatographie mit Massenspektrometrie*
- *Teil 2: Kriterien für die quantitative Bestimmung organischer Stoffe mit einem Multianalyt-Verfahren*

Für die in diesem Dokument zitierten internationalen Dokumente wird im Folgenden auf die entsprechenden deutschen Dokumente hingewiesen:

ISO 17294-1	siehe	DIN EN ISO 17294-1
ISO 17943	siehe	DIN EN ISO 17943
ISO 21253-2	siehe	DIN EN ISO 21253-2
ISO 22892	siehe	DIN EN ISO 22892
ISO/IEC 17025	siehe	DIN EN ISO/IEC 17025

Aktuelle Informationen zu diesem Dokument können über die Internetseiten von DIN (www.din.de) durch eine Suche nach der Dokumentennummer aufgerufen werden.

Nationaler Anhang NA (informativ)

Literaturhinweise

DIN EN ISO 17294-1, *Wasserbeschaffenheit — Anwendung der induktiv gekoppelten Plasma-Massenspektrometrie (ICP-MS) — Teil 1: Allgemeine Anleitung*

DIN EN ISO 17943, *Wasserbeschaffenheit — Bestimmung flüchtiger organischer Verbindungen in Wasser — Verfahren mittels Headspace-Festphasenmikroextraktion (HS-SPME) gefolgt von der Gaschromatographie und Massenspektrometrie (GC-MS)*

DIN EN ISO 21253-2, *Wasserbeschaffenheit — Gemeinsam erfassbare Stoffgruppen — Teil 2: Kriterien für die quantitative Bestimmung organischer Stoffe mit einem Multianalyt-Verfahren*

DIN EN ISO 22892, *Bodenbeschaffenheit — Anleitungen für die Identifizierung von Zielverbindungen durch Gaschromatographie und Massenspektrometrie*

DIN EN ISO/IEC 17025, *Allgemeine Anforderungen an die Kompetenz von Prüf- und Kalibrierlaboratorien*

— Leerseite —

Deutsche Fassung

**Wasserbeschaffenheit —
Gemeinsam erfassbare Stoffgruppen —
Teil 1: Kriterien für die Identifizierung von Zielverbindungen
mittels Gaschromatographie und Flüssigchromatographie mit
Massenspektrometrie (ISO 21253-1:2019)**

Water quality —
Multi-compound class methods —
Part 1: Criteria for the identification of target
compounds by gas and liquid chromatography and
mass spectrometry (ISO 21253-1:2019)

Qualité de l'eau —
Méthodes d'analyse de composés multi-classes —
Partie 1: Critères pour l'identification des composés
cibles par chromatographie en phase gazeuse et liquide
et spectrométrie de masse (ISO 21253-1:2019)

Diese Europäische Norm wurde vom CEN am 9. August 2019 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 CEN-CENELEC-Management-Zentrum 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, Estland, Finnland, Frankreich, Griechenland, Irland, Island, Italien, Kroatien, Lettland, Litauen, Luxemburg, Malta, den Niederlanden, Norwegen, Österreich, Polen, Portugal, der Republik Nordmazedonien, Rumänien, Schweden, der Schweiz, Serbien, 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: Rue de la Science 23, B-1040 Brüssel

Inhalt

	Seite
Europäisches Vorwort	4
Vorwort	5
Einleitung	6
1 Anwendungsbereich	7
2 Normative Verweisungen	7
3 Begriffe	7
4 Abkürzungen	9
5 Grundlage des Verfahrens	9
6 Geräte	10
7 Identifizierung von Zielverbindungen	10
7.1 Verfahren für die Identifizierung organischer Verbindungen mittels Chromatographie- Massenspektrometrie	10
7.1.1 Schritt 1	10
7.1.2 Schritt 2	11
7.1.3 Schritt 3	11
7.2 Schritt 1: Chromatographische Trennung	13
7.3 Schritt 2: Massenspektrometrische Auswertung	13
7.3.1 Massenspektrometrischer Nachweis	13
7.3.2 Auswahl der Diagnose-Ionen	14
7.3.3 Vergabe von Identifizierungspunkten	15
7.4 Schritt 3: Auswertung zusätzlicher analytischer Bestätigungsmethoden	17
7.5 Dokumentation des Vorhandenseins von Zielverbindungen	17
7.5.1 Identifizierung	17
7.5.2 Anzeichen	17
7.5.3 Nichtvorhandensein der Zielverbindung (< Nachweisgrenze)	18
8 Prüfbericht	18
Anhang A (informativ) Empfehlungen für die am häufigsten verwendeten Verfahren	19
A.1 Überblick	19
A.2 Empfehlungen für den Einzelionendetektions-Modus	19
A.3 Empfehlungen für die Detektion und Identifizierung durch Tandem- Massenspektrometrie	19
A.4 Empfehlungen zur Durchführung der Bestimmung der exakten Masse	19
Anhang B (normativ) Kriterien für Full Scan Messungen	21
Anhang C (informativ) Für die Identifizierung mittels GC-MS ⁿ und LC-MS ⁿ zu verwendende Diagnose-Ionen	22
C.1 Auswahlkriterien für Diagnose-Ionen	22
C.2 Referenzdokumente mit empfohlenen diagnostischen Ionen	22
Anhang D (informativ) Beispiele für die Berechnung von Identifizierungspunkten	23
D.1 Überblick	23
D.2 Beispiel für die Berechnung von Identifizierungspunkten für die niedrigauflösende EI- GC-MS	23

D.2.1	Allgemeines	23
D.2.2	Identifizierung anhand der relativen Retentionszeit	23
D.2.3	Beispiel auf der Grundlage der maximal zulässigen Abweichung der relativen Intensitäten	24
D.2.4	Schlussfolgerung.....	25
D.3	Beispiel für die Berechnung von Identifizierungspunkten für die niedrigauflösende LC-MS ⁿ	25
D.3.1	Allgemeines	25
D.3.2	Identifizierung anhand der relativen Retentionszeit	25
D.3.3	Beispiel auf der Grundlage der maximal zulässigen Abweichung der relativen Intensitäten	25
D.3.4	Schlussfolgerung.....	26
D.4	Beispiel für die Berechnung von Identifizierungspunkten für die hochauflösende LC-MS ⁿ	26
D.4.1	Allgemeines	26
D.4.2	Identifizierung anhand der relativen Retentionszeit	26
D.4.3	Berechnung der Massengenauigkeit	27
D.4.4	Beispiel auf der Grundlage der maximal zulässigen Abweichung der relativen Intensitäten	27
D.4.5	Schlussfolgerung.....	28
D.5	Beispiel für die Berechnung von Identifizierungspunkten für die niedrigauflösende GC-MS ⁿ	28
D.5.1	Allgemeines	28
D.5.2	Identifizierung anhand der relativen Retentionszeit	28
D.5.3	Beispiel auf der Grundlage der maximal zulässigen Abweichung der relativen Intensitäten	29
D.5.4	Schlussfolgerung.....	29
D.6	Weitere Beispiele zur Berechnung von Identifizierungspunkten.....	29
	Literaturhinweise.....	31

Europäisches Vorwort

Dieses Dokument (EN ISO 21253-1:2019) wurde vom Technischen Komitee ISO/TC 147 „Water quality“ in Zusammenarbeit mit dem Technischen Komitee CEN/TC 230 „Wasseranalytik“ erarbeitet, dessen Sekretariat von DIN gehalten wird.

Diese Europäische Norm muss den Status einer nationalen Norm erhalten, entweder durch Veröffentlichung eines identischen Textes oder durch Anerkennung bis April 2020, und etwaige entgegenstehende nationale Normen müssen bis April 2020 zurückgezogen werden.

Es wird auf die Möglichkeit hingewiesen, dass einige Elemente dieses Dokuments Patentrechte berühren können. CEN ist 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 Republik Nordmazedonien, Estland, Finnland, Frankreich, Griechenland, Irland, Island, Italien, Kroatien, Lettland, Litauen, Luxemburg, Malta, Niederlande, Norwegen, Österreich, Polen, Portugal, Rumänien, Schweden, Schweiz, Serbien, Slowakei, Slowenien, Spanien, Tschechische Republik, Türkei, Ungarn, Vereinigtes Königreich und Zypern.

Anerkennungsnotiz

Der Text von ISO 21253-1:2019 wurde von CEN als EN ISO 21253-1:2019 ohne irgendeine Abänderung genehmigt.

Vorwort

ISO (die Internationale Organisation für Normung) ist eine weltweite Vereinigung nationaler Normungsorganisationen (ISO-Mitgliedsorganisationen). Die Erstellung von Internationalen Normen wird üblicherweise von Technischen Komitees von ISO durchgeführt. Jede Mitgliedsorganisation, die Interesse an einem Thema hat, für welches ein Technisches Komitee gegründet wurde, hat das Recht, in diesem Komitee vertreten zu sein. Internationale staatliche und nichtstaatliche Organisationen, die in engem Kontakt mit ISO stehen, nehmen ebenfalls an der Arbeit teil. ISO arbeitet bei allen elektrotechnischen Themen eng mit der Internationalen Elektrotechnischen Kommission (IEC) zusammen.

Die Verfahren, die bei der Entwicklung dieses Dokuments angewendet wurden und die für die weitere Pflege vorgesehen sind, werden in den ISO/IEC-Direktiven, Teil 1 beschrieben. Es sollten insbesondere die unterschiedlichen Annahmekriterien für die verschiedenen ISO-Dokumentenarten beachtet werden. Dieses Dokument wurde in Übereinstimmung mit den Gestaltungsregeln der ISO/IEC-Direktiven, Teil 2 erarbeitet (siehe www.iso.org/directives).

Es wird auf die Möglichkeit hingewiesen, dass einige Elemente dieses Dokuments Patentrechte berühren können. ISO ist nicht dafür verantwortlich, einige oder alle diesbezüglichen Patentrechte zu identifizieren. Details zu allen während der Entwicklung des Dokuments identifizierten Patentrechten finden sich in der Einleitung und/oder in der ISO-Liste der erhaltenen Patenterklärungen (siehe www.iso.org/patents).

Jeder in diesem Dokument verwendete Handelsname dient nur zur Unterrichtung der Anwender und bedeutet keine Anerkennung.

Für eine Erläuterung des freiwilligen Charakters von Normen, der Bedeutung ISO-spezifischer Begriffe und Ausdrücke in Bezug auf Konformitätsbewertungen sowie Informationen darüber, wie ISO die Grundsätze der Welthandelsorganisation (WTO, en: World Trade Organization) hinsichtlich technischer Handelshemmnisse (TBT, en: Technical Barriers to Trade) berücksichtigt, siehe www.iso.org/iso/foreword.html.

Dieses Dokument wurde vom Technischen Komitee ISO/TC 147, *Water quality*, Unterkomitee SC 2, *Physical, chemical and biochemical methods* erarbeitet.

Eine Auflistung aller Teile der Normenreihe ISO 21253 ist auf der ISO-Internetseite abrufbar.

Rückmeldungen oder Fragen zu diesem Dokument sollten an das jeweilige nationale Normungsinstitut des Anwenders gerichtet werden. Eine vollständige Auflistung dieser Institute ist unter www.iso.org/members.html zu finden.

Einleitung

Die Anwendung der Gaschromatographie (GC) und Flüssigchromatographie (LC) in Kombination mit der massenspektrometrischen (MS) Detektion ist in vielen analytischen Standards übliche Praxis. Der dabei eingesetzte Detektor ist bei ordnungsgemäßer Verwendung ein leistungsfähiges Instrument. Dieses Dokument stellt Kriterien für die Identifizierung von Zielverbindungen in verschiedenen Wasserarten bereit. Dieses Dokument muss in Kombination mit spezifischen analytischen Normen oder in Kombination mit jedem GC-MS- und LC-MS-Verfahren verwendet werden. Das Ergebnis des Verfahrens wird beschrieben als: identifiziert, angezeigt oder nicht vorhanden.

ANMERKUNG Empfehlungen für die am häufigsten verwendeten Techniken siehe Anhang A.

Dieses Dokument beruht grundsätzlich auf ISO 22892 [5].

1 Anwendungsbereich

Dieses Dokument legt Kriterien für die massenspektrometrische Identifizierung von Zielverbindungen in Wasserproben fest und ist im Allgemeinen auf Umweltproben anwendbar. Dieses Dokument ist für die Anwendung in Verbindung mit einer Norm vorgesehen, die für die Bestimmung bestimmter Verbindungen entwickelt wurde. Wenn ein genormtes Verfahren für die Analyse bestimmter Verbindungen Kriterien für die Identifizierung enthält, dann sind diese Kriterien zu befolgen.

2 Normative Verweisungen

Die folgenden Dokumente werden im Text in solcher Weise in Bezug genommen, dass einige Teile davon oder ihr gesamter Inhalt Anforderungen des vorliegenden Dokuments darstellen. 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).

ISO 6107 (alle Teile), *Water quality — Vocabulary*

3 Begriffe

Für die Anwendung dieses Dokuments gelten die Begriffe nach ISO 6107 und die folgenden Begriffe.

ISO und IEC stellen terminologische Datenbanken für die Verwendung in der Normung unter den folgenden Adressen bereit:

- ISO Online Browsing Platform: verfügbar unter <http://www.iso.org/obp>
- IEC Electropedia: verfügbar unter <http://www.electropedia.org/>

3.1

Diagnose-Ion

ausgewähltes Fragment-Ion, Molekül-Ion oder sonstiges charakteristisches Ion aus dem Massenspektrum der *Zielverbindung* (3.7) mit der höchstmöglichen Spezifität

[QUELLE: ISO 22892:2006, 3.6]

3.2

Identifizierungspunkt

Ergebnis der massenspektrometrischen Untersuchung oder sonstiger Untersuchungen/Informationen, die der Identifizierung eines Bestandteils in Umweltmatrizes dienen

[QUELLE: ISO 22892:2006, 3.7]

3.3

relative Retentionszeit

Verhältnis zwischen der Retentionszeit der *Zielverbindung* (3.7) und der Retentionszeit des *Retentionszeitstandards* (3.4)

[QUELLE: ISO 22892:2006, 3.4]

3.4

Retentionszeitstandard

Verbindung, die der Probe (oder dem Probenextrakt) und der externen Standardlösung zugegeben und eingesetzt wird, um die *relativen Retentionszeiten* (3.3) der *Zielverbindungen* (3.7) zu berechnen

[QUELLE: ISO 22892:2006, 3.3]