DIN EN ISO 21253-1:2022-12 (D)

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

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**