

# 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 <sup>n</sup> und LC-MS <sup>n</sup> 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 <sup>n</sup> .....	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 <sup>n</sup> .....	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 <sup>n</sup> .....	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