

---

---

**Qualité de l'eau — Méthodes d'analyse  
de composés multi-classes —**

Partie 1:

**Critères pour l'identification  
de composés cibles par  
chromatographie en phase gazeuse ou  
liquide et spectrométrie de masse**

iTeh STANDARD PREVIEW  
(standards.iteh.ai)

*Water quality — Multi-compound class methods —*

*Part 1: Criteria for the identification of target compounds by gas and  
liquid chromatography and mass spectrometry*

<https://standards.iteh.ai/catalog/standards/sist/76179e60-7438-43a2-8534-258c25de36a2/iso-21253-1-2019>



**iTeh STANDARD PREVIEW**  
**(standards.iteh.ai)**

ISO 21253-1:2019

<https://standards.iteh.ai/catalog/standards/sist/76b79e60-2438-43a2-8534-258c25de36a2/iso-21253-1-2019>



**DOCUMENT PROTÉGÉ PAR COPYRIGHT**

© ISO 2019

Tous droits réservés. Sauf prescription différente ou nécessité dans le contexte de sa mise en œuvre, aucune partie de cette publication ne peut être reproduite ni utilisée sous quelque forme que ce soit et par aucun procédé, électronique ou mécanique, y compris la photocopie, ou la diffusion sur l'internet ou sur un intranet, sans autorisation écrite préalable. Une autorisation peut être demandée à l'ISO à l'adresse ci-après ou au comité membre de l'ISO dans le pays du demandeur.

ISO copyright office  
Case postale 401 • Ch. de Blandonnet 8  
CH-1214 Vernier, Genève  
Tél.: +41 22 749 01 11  
Fax: +41 22 749 09 47  
E-mail: [copyright@iso.org](mailto:copyright@iso.org)  
Web: [www.iso.org](http://www.iso.org)

Publié en Suisse

## Sommaire

Page

<b>Avant-propos</b> .....	<b>iv</b>
<b>Introduction</b> .....	<b>v</b>
<b>1 Domaine d'application</b> .....	<b>1</b>
<b>2 Références normatives</b> .....	<b>1</b>
<b>3 Termes et définitions</b> .....	<b>1</b>
<b>4 Abréviations</b> .....	<b>2</b>
<b>5 Principe</b> .....	<b>3</b>
<b>6 Appareillage</b> .....	<b>4</b>
<b>7 Identification des composés cibles</b> .....	<b>4</b>
7.1 Mode opératoire d'identification des composés cibles par chromatographie avec détection par spectrométrie de masse.....	4
7.1.1 Étape 1.....	4
7.1.2 Étape 2.....	4
7.1.3 Étape 3.....	5
7.2 Étape 1: Séparation chromatographique.....	7
7.3 Étape 2: Évaluation par spectrométrie de masse.....	7
7.3.1 Détection par spectrométrie de masse.....	7
7.3.2 Sélection des ions de diagnostic.....	8
7.3.3 Affectation des points de concordance.....	8
7.4 Étape 3: Évaluation supplémentaire par confirmation analytique.....	10
7.5 Notation de la présence des composés cibles.....	10
7.5.1 Identification.....	10
7.5.2 Indication/suspicion.....	10
7.5.3 Absence de composés cibles (<à la limite de détection).....	11
<b>8 Rapport d'essai</b> .....	<b>11</b>
<b>Annexe A (informative) Recommandations applicables aux techniques les plus couramment utilisées</b> .....	<b>12</b>
<b>Annexe B (normative) Critères pour une mesure par balayage complet</b> .....	<b>14</b>
<b>Annexe C (informative) Ions de diagnostic à utiliser pour l'identification par CG-SM<sup>n</sup> et CL-SM<sup>n</sup></b> .....	<b>15</b>
<b>Annexe D (informative) Exemples de calcul des points de concordance</b> .....	<b>16</b>
<b>Bibliographie</b> .....	<b>24</b>

## Avant-propos

L'ISO (Organisation internationale de normalisation) est une fédération mondiale d'organismes nationaux de normalisation (comités membres de l'ISO). L'élaboration des Normes internationales est en général confiée aux comités techniques de l'ISO. Chaque comité membre intéressé par une étude a le droit de faire partie du comité technique créé à cet effet. Les organisations internationales, gouvernementales et non gouvernementales, en liaison avec l'ISO participent également aux travaux. L'ISO collabore étroitement avec la Commission électrotechnique internationale (IEC) en ce qui concerne la normalisation électrotechnique.

Les procédures utilisées pour élaborer le présent document et celles destinées à sa mise à jour sont décrites dans les Directives ISO/IEC, Partie 1. Il convient, en particulier, de prendre note des différents critères d'approbation requis pour les différents types de documents ISO. Le présent document a été rédigé conformément aux règles de rédaction données dans les Directives ISO/IEC, Partie 2 (voir [www.iso.org/directives](http://www.iso.org/directives)).

L'attention est attirée sur le fait que certains des éléments du présent document peuvent faire l'objet de droits de propriété intellectuelle ou de droits analogues. L'ISO ne saurait être tenue pour responsable de ne pas avoir identifié de tels droits de propriété et averti de leur existence. Les détails concernant les références aux droits de propriété intellectuelle ou autres droits analogues identifiés lors de l'élaboration du document sont indiqués dans l'Introduction et/ou dans la liste des déclarations de brevets reçues par l'ISO (voir [www.iso.org/brevets](http://www.iso.org/brevets)).

Les appellations commerciales éventuellement mentionnées dans le présent document sont données pour information, par souci de commodité, à l'intention des utilisateurs et ne sauraient constituer un engagement.

Pour une explication de la nature volontaire des normes, la signification des termes et expressions spécifiques de l'ISO liés à l'évaluation de la conformité, ou pour toute information au sujet de l'adhésion de l'ISO aux principes de l'Organisation mondiale du commerce (OMC) concernant les obstacles techniques au commerce (OTC), voir [www.iso.org/avant-propos](http://www.iso.org/avant-propos).

Le présent document a été élaboré par le comité technique ISO/TC 147, *Qualité de l'eau*, sous-comité SC 2, *Méthodes physiques, chimiques et biochimiques*.

Une liste de toutes les parties de la série ISO 21253 se trouve sur le site web de l'ISO.

Il convient que l'utilisateur adresse tout retour d'information ou toute question concernant le présent document à l'organisme national de normalisation de son pays. Une liste exhaustive desdits organismes se trouve à l'adresse [www.iso.org/fr/members.html](http://www.iso.org/fr/members.html).

## Introduction

La chromatographie en phase gazeuse (CG) et la chromatographie en phase liquide (CL), en association avec une méthode de détection par spectrométrie de masse (SM), sont couramment utilisées dans de nombreuses normes d'analyse. Ce détecteur est un outil puissant à condition d'être utilisé convenablement. Le présent document établit des critères d'identification des composés cibles dans différents types d'eau. Le présent document doit être utilisé conjointement avec des normes spécifiques d'analyse ou avec n'importe quel mode opératoire de CG-SM et de CL-SM. Le résultat obtenu au moyen du mode opératoire décrit est « identifié », « suspecté » ou « absent ».

NOTE Voir l'[Annexe A](#) pour des recommandations sur les techniques les plus couramment utilisées.

Le présent document est globalement basé sur l'ISO 22892[5].

## iTeh STANDARD PREVIEW (standards.iteh.ai)

ISO 21253-1:2019

<https://standards.iteh.ai/catalog/standards/sist/76b79e60-2438-43a2-8534-258c25de36a2/iso-21253-1-2019>

**iTeh STANDARD PREVIEW**  
**(standards.iteh.ai)**

ISO 21253-1:2019

<https://standards.iteh.ai/catalog/standards/sist/76b79e60-2438-43a2-8534-258c25de36a2/iso-21253-1-2019>

# Qualité de l'eau — Méthodes d'analyse de composés multi-classes —

## Partie 1:

# Critères pour l'identification de composés cibles par chromatographie en phase gazeuse ou liquide et spectrométrie de masse

## 1 Domaine d'application

Le présent document spécifie des critères pour l'identification par spectrométrie de masse de composés cibles dans des échantillons d'eau et est applicable aux échantillons environnementaux en général. Le présent document est destiné à être utilisé en association avec des normes élaborées pour permettre la détermination de composés spécifiques. Si une méthode normalisée d'analyse de composés spécifiques inclut des critères d'identification, ces critères sont appliqués.

## 2 Références normatives

Les documents suivants cités dans le texte constituent, pour tout ou partie de leur contenu, des exigences du présent document. Pour les références datées, seule l'édition citée s'applique. Pour les références non datées, la dernière édition du document de référence s'applique (y compris les éventuels amendements).

ISO 6107 (toutes les parties), *Qualité de l'eau — Vocabulaire*

## 3 Termes et définitions

Pour les besoins du présent document, les termes et définitions donnés dans l'ISO 6107 (toutes les parties) ainsi que les suivants s'appliquent.

L'ISO et l'IEC tiennent à jour des bases de données terminologiques destinées à être utilisées en normalisation, consultables aux adresses suivantes:

- ISO Online browsing platform: disponible à l'adresse <https://www.iso.org/obp>
- IEC Electropedia: disponible à l'adresse <http://www.electropedia.org/>

### 3.1

#### ion de diagnostic

ion fragment sélectionné, ion moléculaire ou autre ion caractéristique issu du spectre de masse du composé cible (3.7) présentant la spécificité la plus élevée possible[SOURCE: ISO 22892:2006, 3.6]3.2

### 3.2

#### indice de concordance

#### point de concordance

résultat des investigations en spectrométrie de masse ou d'autres recherches/informations destinées à identifier un composé dans des matrices environnementales

[SOURCE: ISO 22892:2006, 3.7]

### 3.3

#### **temps de rétention relatif**

rapport entre le temps de rétention du *composé cible* (3.7) et celui de l'*étalon de temps de rétention* (3.4)

[SOURCE: ISO 22892:2006, 3.4]

### 3.4

#### **étalon de temps de rétention**

composé qui est ajouté à l'échantillon (ou à l'extrait d'échantillon) et à la solution d'étalonnage et qui sert à calculer les *temps de rétention relatifs* (3.3) des *composés cibles* (3.7)

[SOURCE: ISO 22892:2006, 3.3]

### 3.5

#### **mesure d'ions sélectionnés**

##### **SIM**

mesure de l'abondance des *ions de diagnostic* (3.1) sélectionnés

### 3.6

#### **composé étalon**

*composé cible* (3.7), de la plus grande pureté possible, qui peut être utilisé comme une référence au cours de l'analyse

Note 1 à l'article: Il convient que les impuretés n'aient pas d'influence sur le spectre de masse du composé étalon.

[SOURCE: ISO 22892:2006, 3.2]

### 3.7

#### **composé cible**

composé sélectionné dont on est en train d'établir la présence ou l'absence

Note 1 à l'article: Cette définition peut également s'appliquer à un dérivé du composé d'origine qui est formé au cours d'un mode opératoire de dérivation spécifique.

[SOURCE: ISO 22892:2006, 3.1]

### 3.8

#### **étalon de référence**

solution préparée à partir d'un étalon secondaire et/ou de solutions mères, et utilisée pour étalonner la réponse de l'instrument en fonction de la concentration en analytes

[SOURCE: ISO 18073:2004, 3.1.2]

### 3.9

#### **solution d'étalonnage**

solution utilisée pour étalonner l'instrument, préparée à partir d'une ou de plusieurs solutions mères ou d'un étalon certifié

[SOURCE: ISO 17294-1:2004, 3.4]

## 4 Abréviations

APCI	ionisation chimique à pression atmosphérique [atmospheric pressure chemical ionization]
CG	chromatographie en phase gazeuse
CG-SM	chromatographie en phase gazeuse avec détection par spectrométrie de masse
CI	ionisation chimique [chemical ionization]



CL	chromatographie en phase liquide
CL-SM	chromatographie en phase liquide avec détection par spectrométrie de masse
Da	Dalton
DCE	détecteur à capture d'électrons
EI	ionisation à impact électronique [electron ionization]
EI-CG-SM	chromatographie en phase gazeuse avec détection par spectrométrie de masse et ionisation à impact électronique
ESI	ionisation par électronébuliseur [electrospray ionization]
FWHM	largeur totale à mi-hauteur [full width at half maximum]
mDa	milliDalton
MRM	mesure de réactions multiples
MTBE	méthyl tert-butyl éther
<i>m/z</i>	rapport masse/charge
NPD	détecteur azote-phosphore [nitrogen-phosphorus detector]
PFPD	détecteur à photométrie de flamme pulsée [pulsed flame photometric detector]
PID	détecteur par photoionisation [photoionization detector]
POC	pesticides organochlorés
S/B	rapport signal/bruit
SIM	mesure d'ions sélectionnés [selected ion monitoring]
SM	spectrométrie de masse
SMHR	spectrométrie de masse à haute résolution
SM <sup>n</sup>	spectrométrie de masse
SRM	mesure de réactions sélectionnées [selected reaction monitoring]
TAME	tert-amyl méthyl éther
UV/Vis	spectroscopie ultraviolet-visible

## 5 Principe

Un composé cible est considéré comme identifié lorsque les valeurs des paramètres mesurés satisfont aux critères spécifiés dans le présent document ou dans la norme qui décrit les modes opératoires d'analyse relatifs au composé cible. Ces critères sont fondés sur les temps de rétention relatifs et le rapport d'abondance des ions de diagnostic, ainsi que sur d'autres facteurs pertinents. Il est possible d'utiliser des informations complémentaires sur les ions de diagnostic, contenues dans les normes internationales spécifiques relatives à l'analyse du composé cible. Le principe du dénombrement des points de concordance est utilisé pour l'identification (voir [Annexe D](#)).

## 6 Appareillage

Du fait que le présent document est complémentaire par rapport à d'autres normes utilisant la CG-SM et la CL-SM, il est supposé que l'instrumentation utilisée satisfait aux exigences de ces normes et que, dès lors, une description détaillée n'entre pas dans le domaine d'application du présent document. Les exigences minimales d'acquisition pour la spectrométrie de masse à basse résolution et à faible résolution sont récapitulées aux [Tableaux 1](#) et [2](#).

**Tableau 1 — Exigences minimales d'acquisition pour la spectrométrie de masse à basse résolution**

Plage de masses:	Les pics (masses) ayant un rapport $S/B < 3$ ne sont pas pris en considération et l'extrémité inférieure de la plage de balayage est limitée à 35 (afin d'éviter le mesurage de l'oxygène et de l'azote) et la masse la plus élevée à celle du composé cible +10 unités de masse atomique (u) lors des mesurages par balayage complet.
Vitesse de balayage:	Au moins 7 balayages par pic.
Mode de balayage:	Balayage complet ou SIM.
Résolution de masse:	À régler sur la résolution nominale, il convient que la largeur du pic à mi-hauteur de chaque masse réglée ne dépasse pas 0,7 DA.

**Tableau 2 — Exigences minimales d'acquisition pour la spectrométrie de masse à haute résolution**

Vitesse de balayage:	Au moins 7 balayages par pic.
Résolution de masse:	La résolution doit être supérieure à 10 000 FWHM pour la plage de masses utilisée.
Précision de masse:	Il convient que la précision de masse soit $\leq 5$ ppm.

ISO 21253-1:2019

## 7 Identification des composés cibles

<https://standards.iteh.ai/catalog/standards/sist/76b79e60-2438-43a2-8534-258c25de36a2/iso-21253-1-2019>

**IMPORTANT** — L'utilisation de l'équipement et la détermination doivent être effectuées par un personnel dûment formé.

### 7.1 Mode opératoire d'identification des composés cibles par chromatographie avec détection par spectrométrie de masse

Le mode opératoire utilisé pour identifier un composé cible consiste en trois étapes (voir organigramme à la [Figure 1](#)).

#### 7.1.1 Étape 1

Évaluation chromatographique (voir [7.2](#)): le temps de rétention relatif doit satisfaire aux critères spécifiés.

Passer à l'étape 2 uniquement si l'étape 1 produit un résultat positif.

#### 7.1.2 Étape 2

Évaluation par spectrométrie de masse (voir [7.3](#)): collecte des indices de concordance à l'aide des données de spectrométrie de masse. Pour la qualification, le principe des indices de concordance est utilisé (voir EN 16693[1]).

Ces derniers peuvent être obtenus à partir des données de spectrométrie de masse, mais également à partir d'autres informations analytiques.

### 7.1.3 Étape 3

Évaluation supplémentaire par confirmation analytique (voir 7.4).

La classification suivante peut être obtenue:

- a) identifié (voir 7.5.1): le composé cible est présent dans l'extrait analysé si au moins 3 points de concordance sont obtenus;
- b) suspecté (voir 7.5.2): le composé cible peut être présent si seulement 1 ou 2 points de concordance sont obtenus;
- c) absent (au-dessous de la limite de détection) (voir 7.5.3): aucun indice de concordance n'est obtenu en utilisant la spectrométrie de masse.

Si la classification « suspecté » n'est pas utilisée, tout résultat pour lequel moins de 3 points de concordance sont obtenus doit être considéré comme non identifié.

**iTeh STANDARD PREVIEW**  
**(standards.iteh.ai)**

ISO 21253-1:2019

<https://standards.iteh.ai/catalog/standards/sist/76b79e60-2438-43a2-8534-258c25de36a2/iso-21253-1-2019>

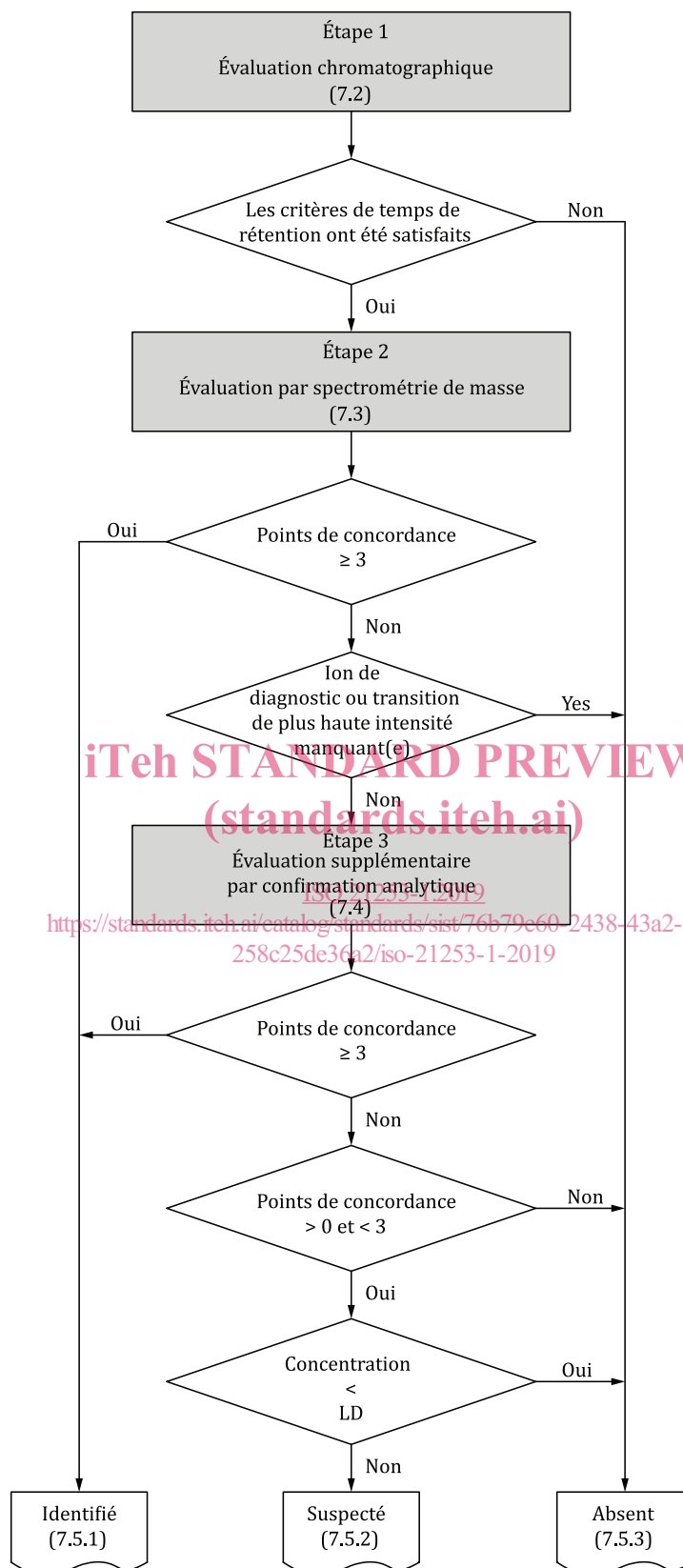


Figure 1 — Logigramme d'identification d'un composé cible en trois étapes