

1. Fehler bei Analyseverfahren

Zufällige (statistische) Abweichungen (zufällige Fehler)

- „Unvermeidliche, zufällige, vom Einfluss des Analytikers unabhängige Schwankungen der Messwerte bei wiederholter Durchführung einer analytischen Methode unter genau den gleichen Bedingungen (Wiederholbedingungen). Ein Maß für diese zufälligen Abweichungen ist die **Präzision**.“
- die **ermittelten Werte können richtig sein**, wenn sich Fehler gegenseitig aufheben

Systematische Abweichungen (systematische Fehler)

- „Abweichungen, die auf eine vorhandene Störung des Analyseverfahrens zurückzuführen sind, z. B. mangelhafte Geräte, nicht genau eingestellte Normallösungen, Verunreinigungen von Reagenzien, unvollständige Extraktionen, Zersetzungen, Einfluss von Begleitstoffen, eine sich wiederholende falsche persönliche Verfahrensweise u. a. Ein Maß für diese systematischen Abweichungen ist die **Richtigkeit** bzw. die **Wiederfindung**.“
- die ermittelten Werte sind immer falsch

2. Qualitätsmerkmale für Analyseverfahren

Präzision

- Maß für den Grad der Reproduzierbarkeit der Analyseergebnisse bei wiederholter Durchführung einer analytischen Methode unter genau den selben Bedingungen (Wiederholbedingungen)
- *Wiederholpräzision:*
 - mehrmalige Wiederholung des Analyseverfahrens am gleichen Objekt unter genau den selben Bedingungen mit dem selben Gerät im selben Labor vom selben Analytiker ⇒ **Wiederholstandardabweichung**
- *Vergleichspräzision:*
 - wiederholte Durchführung des Analyseverfahrens am gleichen Objekt in verschiedenen Laboratorien durch verschiedene Analytiker mit verschiedenen Geräteausstattungen ⇒ **Vergleichsstandardabweichung**

Richtigkeit

- Abweichung des Mittelwertes der Bestimmungen vom wahren Wert
- wenn der wahre Wert unbekannt ist, verwendet man einen Näherungswert (richtiger Wert)

Nachweisgrenze

- gilt für qualitative Analysen
- gibt die niedrigste Masse (g, mg, µg, ng) bzw. den geringsten Gehalt (Grenzkonzentration) einer Substanz (% , ppm, ppb, mol/l) an, die mit dem Verfahren noch zuverlässig nachgewiesen werden kann

Bestimmungsgrenze

- gilt für quantitative Bestimmungen
- niedrigste Masse bzw. niedrigster Gehalt, der unter den angegebenen Analysebedingungen in dem vorliegenden Material noch mit akzeptabler Präzision und Richtigkeit bestimmt werden kann

Selektivität

- gibt an, inwieweit ein Verfahren für eine bestimmte Substanz in Gegenwart anderer Substanzen präzise und richtige Ergebnisse liefert

Linearität

- beschreibt die Proportionalität zwischen den Messergebnissen und der Stoffmenge bzw. der Konzentration
- gilt praktisch nur für einen bestimmten Konzentrationsbereich (Bestimmungsbereich)

Empfindlichkeit

- beschreibt, wie stark ein Messergebnis auf Konzentrationsänderungen reagiert

- $$\text{Empfindlichkeit } E = \frac{\text{Zuwachs der Messgröße}}{\text{Zunahme um eine Konzentrationseinheit der zu bestimmenden Substanz}} = \frac{\Delta M}{\Delta c}$$

- bei direkter Proportionalität \Rightarrow Empfindlichkeit = Steigung der Kalibriergeraden

Bestimmungsbereich

- Massen- bzw. Konzentrationsintervall, in welchem der zu bestimmende Stoff mit der angegebenen Präzision und Richtigkeit bestimmt werden kann

Robustheit

- Störanfälligkeit, Belastbarkeit gegenüber äußeren Einflüssen
- Widerstandsfähigkeit gegen stärkere Abänderungen der Analysebedingungen und gegen Störeffekte
- robustes Verfahren \Rightarrow Störeffekte haben keinen oder nur einen geringen Einfluss auf das Analyseergebnis