

Inhaltsverzeichnis

Begriffe und Symbole	XI
1 Einführung	1
2 Grundlagen	5
2.1 Definitionen von Kenngrößen und mathematische Modelle	5
2.1.1 Nachweiskriterien	5
2.1.2 Qualitätskriterien für quantitative Bestimmungen	8
2.2 Erfordernisse der Praxis	10
2.3 Verfahrenscharakterisierung und Ergebnisinterpretation	11
2.3.1 Zusammenhänge und Unterschiede	11
2.3.2 Verwendung von Kenngrößen zur Verfahrensauswahl und -anpassung für spezielle analytische Aufgabenstellungen	13
2.4 Terminologie	14
2.4.1 Oberbegriffe: Empfindlichkeit und Nachweisvermögen	15
2.4.2 Nachweis- und Erfassungsgrenze	16
2.4.3 Bestimmungsgrenze	18
3 Mathematische Näherungslösungen zur Ermittlung der Kenngrößen	21
3.1 Der induktive Weg nach Kaiser	21
3.1.1 Nachweiskriterien	22
3.1.2 Bestimmungsgrenze	24
3.1.3 Akzeptanz und kritische Wertung des Kaiserschen Ansatzes	25
3.1.3.1 Wahl eines konstanten Faktors $k = 3$	25
3.1.3.2 Die reale Blindwertverteilung	26
3.1.3.3 Berücksichtigung der Unsicherheit der Kalibrierfunktion	29
3.2 Ableitung der Kenngrößen auf Basis der Hypothesentestung	31
3.2.1 Voraussetzungen und Definitionsgleichungen	32
3.2.2 Schätzung der erforderlichen Parameter	35
3.2.3 Ermittlung der Kenngrößen im Signalraum	40
3.2.4 Ermittlung der Kenngrößen im Gehaltsraum bei bekannter Kalibrierfunktion	40
3.2.5 Ermittlung der Kenngrößen im Gehaltsraum bei geschätzter Kalibrierfunktion	41

3.3	Ableitung der Kenngrößen aus Unsicherheitsintervallen . . .	47
3.3.1	Allgemeines Konzept der Messunsicherheit	49
3.3.2	Lokale Konfidenzintervalle	53
3.3.3	Simultane Anteilsbereiche	58
3.3.4	Gewichtete lokale Toleranzintervalle	65
3.4	Ermittlung der Kenngrößen aus dem Signal-Rausch-Verhältnis	69
3.4.1	Definitionen des Signal-Rausch-Verhältnisses	69
3.4.2	Optimierung analytischer Messsysteme	72
3.4.3	Charakterisierung dynamischer analytischer Messmethoden	75
4	Verfahrens- und Ergebnisbewertung nach DIN	81
4.1	Laborinterne Nachweis-, Erfassungs- und Bestimmungsgrenze (Ermittlung unter Wiederholbedingungen)	83
4.2	Erfassungs- und Bestimmungsgrenze als Verfahrenskenn- größen (Ermittlung unter Vergleichsbedingungen)	87
4.3	Anwendungsaspekte und -grenzen	89
5	Ermittlung der Kenngrößen in speziellen Fällen	99
5.1	Abweichung von den geforderten Voraussetzungen	99
5.1.1	Modellierung stetiger nicht-normaler Messwertverteilungen .	99
5.1.2	Verteilungsfreie Tests	101
5.1.3	Varianzinhomogenität (Heteroskedastizität)	103
5.1.4	Diskrete Verteilungen	104
5.1.4.1	Röntgenspektrometrie	105
5.1.4.2	Radiometrie	107
5.1.5	Nichtlineare Kalibrierfunktionen	108
5.2	Mehrkomponentenanalyse	110
5.2.1	Grundlagen	110
5.2.2	Multiple Entscheidungen	113
5.2.3	Multivariate Kenngrößen	114
6	Konsequenzen aus der statistischen Entscheidungstheorie	119
6.1	Auswertung abgeschnittener Verteilungen	119
6.2	Verwertung analytischer Binäraussagen	124
6.2.1	Begriffe und Modelle	124
6.2.2	Screening-Tests	125
6.2.3	Immunoassays	134
6.2.4	Frequentometrie	135
6.2.5	Kontrolle von Schwellenwerten	137
7	Zusammenfassung und Schlussfolgerungen	141

Anhang	147
Literatur	149
Sachverzeichnis	159