

ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑ ΥΠΟΛΟΓΙΣΜΟΥ ΟΡΙΟΥ ΑΝΙΧΝΕΥΣΗΣ ΚΑΙ ΠΟΣΟΤΙΚΟΠΟΙΗΣΗΣ

Από τα στοιχεία της επικύρωσης για την καμπύλη αναφοράς της μεθόδου μπορούν να υπολογισθούν τα (θεωρητικά) όρια ανίχνευσης και ποσοτικοποίησης, τα οποία στη συνέχεια πρέπει να επαληθεύονται με παρασκευή ενισχυμένων δειγμάτων στα επίπεδα LOD και LOQ.

Έστω ότι η εξίσωση παλινδρόμησης ελαχίστων τετραγώνων καμπύλης αναφοράς που σχηματίστηκε από ενισχυμένα δείγματα σε χαμηλές συγκεντρώσεις είναι η εξής:

$$P_i = 250(\pm 36) + 1,257(\pm 0,081) \times 10^3 \cdot C_i \text{ (}\mu\text{g/g)}$$

$$S_{y/x} = 41, r = 0,9997$$

Η %RSD του σήματος λευκού δείγματος (blank) με μέση τιμή σήματος 263 ήταν 14%.

Να υπολογισθούν τα όρια ανίχνευσης (LOD) της μεθόδου με όλους τους δυνατούς τρόπους:

1) Από την τυπική απόκλιση της τομής (± 36):

$$\text{Το LOD θα εμφανίζει σήμα } 250 + (3,3 \times 36) = 369$$

Οπότε από την εξίσωση προκύπτει συγκέντρωση:

$$\text{LOD} = (369 - 250) / 1,257 \times 10^3 = \underline{0,095 \mu\text{g/g.}}$$

ή απλούστερα:

$$\text{LOD} = (3,3 \times 36) / 1,257 \times 10^3 = 0,095 \mu\text{g/g.}$$

2) Από την τυπική απόκλιση των υπολοίπων $S_{y/x} = 41$:

$$\text{LOD} = (3,3 \times 41) / 1,257 \times 10^3 = \underline{0,108 \mu\text{g/g.}}$$

3) Από την τυπική απόκλιση του λευκού δείγματος (blank):

$$S_{\text{blanc}} = 263 \times (14/100) = 36,8$$

$$\text{LOD} = (3,3 \times 36,8) / 1,257 \times 10^3 = \underline{0,097 \mu\text{g/g.}}$$

Οι τρεις τιμές είναι πρακτικά ίσες.