



Eurachem

A focus for analytical chemistry in Europe

Terminologie bei Analytischen Messungen

Eine Einführung in den VIM 3

2. Auflage 2023

(deutsch-englische Version 2026)

Terminologie bei Analytischen Messungen Eine Einführung in den VIM 3

Zweite Auflage 2023

Deutsch-englische Version 2026

Herausgeber

Vicki Barwick (LGC, UK)

Projektgruppe

Fatma Akçadağ	TUBITAK Ulusal Metroloji Enstitüsü (UME), TR
Mine Bilsel	TUBITAK Ulusal Metroloji Enstitüsü (UME), TR
Oktay Cankur	TUBITAK Ulusal Metroloji Enstitüsü (UME), TR
Michael Koch	University of Stuttgart, DE
Bertil Magnusson	Trollboken AB, SE
David Milde	Palacký University in Olomouc, CZ
Ulf Örnemark	Emendo Dokumentgranskning, SE
Marina Patriarca	Istituto Superiore di Sanità, IT
Elizabeth Prichard	UK
Eskil Sahlin	RISE Research Institutes of Sweden, SE
Lorens Sibbesen	Lab Quality International, DK Istituto Nazionale di Ricerca Metrologica,
Michela Segà	IT
Kyriacos Tsimillis	Panyprian Union of Chemists, CY
Perihan Yolcu Ömeroglu	Uludag University, TR

Zitierung

Diese Publikation sollte wie folgt zitiert werden*:

V J Barwick and E Prichard (Eds), Eurachem Guide: Terminology in Analytical Measurement – Introduction to VIM 3 (2011). ISBN 978-0-948926-29-7.

Available from www.eurachem.org.

* je nach Anforderungen der Zeitschrift

Danksagung

Dieses Dokument wurde durch Mitglieder der “Eurachem Education and Training Working Group” und anderen, die sich zu einer Projektgruppe für diese Aufgabe zusammengeschlossen haben, verfasst. Alle, die zu dieser Version beigetragen haben, sind auf der rechten Seite aufgelistet.

Die Erstellung dieses Leitfadens wurde zum Teil unterstützt durch Vertrag mit dem britischen Ministerium für Wissenschaft, Innovation und Technologie (DSIT) im Rahmen des Programms für chemische und biologische Metrologie.

Deutsche Übersetzung

Die Übersetzung ins Deutsche erfolgte durch Dr. Michael Koch mit Unterstützung von EUROLAB-D. Bei der Übersetzung wurde versucht, so weit wie möglich die Nomenklatur aus der deutschen Übersetzung des VIM 3 zu verwenden.

Terminologie bei Analytischen Messungen – Eine Einführung in
den VIM 3

Deutsch-englische Fassung

Zweite Auflage 2026

ISBN der englischen Fassung 978-0-948926-40-2

Copyright © 2023

Das Urheberrecht an diesem Dokument liegt bei den beitragenden Autoren. Alle Anfragen bezüglich der Reproduktion in jedem Medium einschließlich weiterer Übersetzungen, sollten an das Eurachem-Sekretariat gerichtet werden.

Vorwort zur zweiten Auflage

Im Einklang mit der Eurachem-Politik zur Entwicklung und Pflege von Leitfäden wurde 2016, fünf Jahre nach der ursprünglichen Veröffentlichung, eine Überarbeitung der ersten Ausgabe dieses Leitfadens, eingeleitet. Die Überprüfung umfasste eine Umfrage unter Nutzern des Leitfadens, und obwohl das Feedback sehr positiv ausfiel, zeigten die Antworten, dass es einen Spielraum für eine Überarbeitung gab. Darüber hinaus waren seit der Veröffentlichung der ersten Ausgabe eine Reihe von Schlüsseldokumenten, die (z. B. die Norm ISO/IEC 17025) überarbeitet worden. In dieser zweiten Auflage bleiben der Anwendungsbereich und die Struktur sowie die behandelten Begriffe und Konzepte gegenüber der ersten Auflage unverändert. Alle Abschnitte wurden jedoch überprüft und, wo nötig, wurde der Text überarbeitet, um die Klarheit zu verbessern und die Konsistenz mit den aktuellen Leitlinien zu gewährleisten.

Hinweis: Zum Zeitpunkt der Veröffentlichung wird der VIM vom Joint Committee for Guides in Metrology überprüft. Die Leser sollten sich über die geltende Fassung des VIM informieren, bevor sie Definitionen aus diesem Leitfaden zitieren.

Foreword to the second edition

In line with the Eurachem policy on the development and maintenance of guides, a review of the first edition of this Guide was initiated in 2016, five years after its original publication. The review involved a survey of users of the Guide and, while the feedback was very positive, the responses indicated that there was some scope for revision. In addition, since the publication of the first edition, a number of the key documents used in analytical measurement (such as the ISO/IEC 17025 standard) have been revised. In this second edition the scope and structure, and the terms and concepts discussed, remain unchanged from the first edition. However, all sections have been reviewed and, where necessary, the text has been revised to improve clarity and ensure consistency with current guidance.

Note: At the time of publication, the VIM is under review by the Joint Committee for Guides in Metrology. Readers may wish to confirm the version of the VIM in force before citing definitions from this Guide.

Abkürzungen und Formelzeichen

Die folgenden Abkürzungen, Akronyme und Formelzeichen werden in diesem Leitfaden verwendet.

Abkürzungen und Akronyme

BIPM	Internationales Büro für Maß und Gewicht
CCQM	Consultative Committee for Amount of Substance – Metrology in Chemistry and Biology
CGPM	The General Conference on Weights and Measures
CITAC	Cooperation on International Traceability in Analytical Chemistry
ZRM	zertifiziertes Referenzmaterial
ERM®	European Reference Material
GC-FID	Gaschromatographie mit Flammenionisationsdetektor
GC-MS	Gaschromatographie mit Massenspektrometrie
IEC	International Electrotechnical Commission
IFCC	International Federation of Clinical Chemistry and Laboratory Medicine
ISO	International Organization for Standardization
IUPAC	International Union of Pure and Applied Chemistry
JCGM	Joint Committee for Guides in Metrology
JCTLM	Joint Committee for Traceability in Laboratory Medicine
LC-MS	Flüssigkeitschromatographie mit Massenspektrometrie
LOD/NWG	Nachweisgrenze (limit of detection)
LOQ	Bestimmungsgrenze (limit of quantification/quantitation)
NIST	National Institute of Standards and Technology (USA)
NMI	Nationales Metrologieinstitut
PT	Eignungsprüfung (proficiency testing)
RM	Referenzmaterial
SI	International System of Units
SOP	Standardarbeitsanweisung (standard operating procedure)
SRM®	Standard Reference Material (NIST registered trademark)
VIM	Internationales Wörterbuch der Metrologie — Grundlegende und allgemeine Begriffe und zugeordnete Benennungen
VSMOW	Vienna Standard Mean Ocean Water
WHO	Weltgesundheitsorganisation
XRF	Röntgenfluoreszenz

Formelzeichen

α	Wahrscheinlichkeit für einen Typ 1 Fehler	p	Reinheit
β	Wahrscheinlichkeit für einen Typ 2 Fehler	s	Standardabweichung
ρ	Massendichte / Massenkonzentration	u	Standard(mess-)unsicherheit
k	Erweiterungsfaktor zur Berechnung der erweiterten (Mess-)Unsicherheit	u_c	kombinierte Standard(mess-)unsicherheit
m	Masse	U	erweiterte (Mess-)Unsicherheit
M	molare Masse	V	Volumen
n	Stoffmenge		

Abbreviations and symbols

The following abbreviations, acronyms and symbols occur in this Guide.

Abbreviations and acronyms

BIPM	International Bureau of Weights and Measures
CCQM	Consultative Committee for Amount of Substance – Metrology in Chemistry and Biology
CGPM	The General Conference on Weights and Measures
CITAC	Cooperation on International Traceability in Analytical Chemistry
CRM	certified reference material
ERM®	European Reference Material
GC-FID	gas chromatography-flame ionisation detector
GC-MS	gas chromatography-mass spectrometry
IEC	International Electrotechnical Commission
IFCC	International Federation of Clinical Chemistry and Laboratory Medicine
ISO	International Organization for Standardization
IUPAC	International Union of Pure and Applied Chemistry
JCGM	Joint Committee for Guides in Metrology
JCTLM	Joint Committee for Traceability in Laboratory Medicine
LC-MS	liquid chromatography-mass spectrometry
LOD	limit of detection
LOQ	limit of quantification/quantitation
NIST	National Institute of Standards and Technology (USA)
NMI	National Metrology (or Measurement) Institute
PT	proficiency testing
RM	reference material
SI	International System of Units
SOP	standard operating procedure
SRM®	Standard Reference Material (NIST registered trademark)
VIM	International vocabulary of metrology – Basic and general concepts and associated terms (VIM)
VSMOW	Vienna Standard Mean Ocean Water
WHO	World Health Organization
XRF	x-ray fluorescence

Symbols

α	probability for a Type I error	p	purity
β	probability for a Type II error	s	standard deviation
ρ	mass density/mass concentration	u	standard (measurement) uncertainty
k	coverage factor used to calculate expanded (measurement) uncertainty	u_c	combined standard (measurement) uncertainty
m	mass	U	expanded (measurement) uncertainty
M	molar mass	V	volume
n	amount of substance		

Inhaltsverzeichnis

Einführung und Anwendungsbereich.....	viii
Anmerkungen für den Leser	xi
1.0. Allgemeine Metrologie	1
1.1 Metrologie.....	1
1.2 Größe	1
1.3 Nominalmerkmal	1
1.4 Größenwert	2
1.5 Nennwert	3
1.6 Referenzwert	4
1.7 Größensystem.....	4
1.8 Internationales Größensystem	5
1.9 Maßeinheit.....	6
1.10 Messung	7
1.11 Messgröße	8
1.12 Messverfahren.....	10
1.13 Referenzmessverfahren	12
1.14 Primärmessverfahren	12
1.15 Messergebnis	13
1.16 Messwert	14
1.17 Messabweichung.....	14
1.18 Anzeige	15
1.19 Messgerät.....	15
1.20 Messsystem	15
1.21 metrologische Vergleichbarkeit von Messergebnissen.....	16
1.22 metrologische Verträglichkeit von Messergebnissen	17
2.0. Metrologische Rückführbarkeit	18
2.1 Metrologische Rückführbarkeit.....	18
2.2 Kalibrierung	23
2.3 Messgerätedrift.....	24
2.4 Normal	25
2.5 Kalibriernormal	26
2.6 Austauschbarkeit eines Referenzmaterials	28
3.0. Messunsicherheit.....	30
3.1 Messunsicherheit	30
3.2 Messunsicherheitsbilanz	33
4.0. Verifizierung, Validierung und Leistungsfähigkeit von Methoden.....	36
4.1 Verifizierung und Validierung	36
4.2 Selektivität eines Messsystems	37
4.3 Messbereich	38

4.4 Nachweisgrenze	39
4.5 Messrichtigkeit.....	40
4.6 Messpräzision	412
4.7 Messgenauigkeit	45
Anhang.....	47
Literatur.....	53

Table of Contents

Introduction and Scope	viii
Notes for the Reader	xi
1.0. General Metrology	1
1.1 Metrology	1
1.2 Quantity	1
1.3 Nominal property	2
1.4 Quantity value	2
1.5 Nominal quantity value	3
1.6 Reference quantity value	4
1.7 System of quantities	4
1.8 International System of Quantities	5
1.9 Measurement unit	6
1.10 Measurement	7
1.11 Measurand	8
1.12 Measurement procedure	10
1.13 Reference measurement procedure	12
1.14 Primary reference measurement procedure	12
1.15 Measurement result	13
1.16 Measured quantity value	14
1.17 Measurement error	14
1.18 Indication	15
1.19 Measuring instrument	15
1.20 Measuring system	15
1.21 Metrological comparability of measurement results	16
1.22 Metrological compatibility of measurement results	17
2.0. Metrological Traceability	18
2.1 Metrological traceability	18
2.2 Calibration	23
2.3 Instrumental drift	24
2.4 Measurement standard	25
2.5 Calibrator	26
2.6 Commutability of a reference material	28
3.0. Measurement uncertainty	30
3.1 Measurement uncertainty	30
3.2 Uncertainty budget	33
4.0. Verification, Validation and Method Performance	36
4.1 Verification	36
4.2 Selectivity of a measurement system	37
4.3 Measuring interval	38

4.4 Detection limit.....	39
4.5 Measurement trueness.....	41
4.6 Measurement precision.....	42
4.7 Measurement accuracy.....	45
Appendix.....	50
References.....	53

Einführung und Anwendungsbereich

Einführung

Die Welt der Metrologie – der Wissenschaft vom Messen und ihrer Anwendung – hat eine eigene Sprache, die erlernt werden muss. Das Internationale Wörterbuch der Metrologie (der VIM) wurde verfasst, um eine gemeinsame Sprache, in erster Linie für physikalische Messungen, zu definieren. Die dritte Auflage (Internationales Wörterbuch der Metrologie – Grundlegende und allgemeine Begriffe und zugeordnete Benennungen (in diesem Dokument VIM 3 genannt)) wurde durch die WG2 des Joint Committee for Guides in Metrology (JCGM) erstellt und als JCGM 200:2008 und als ISO Leitfaden 99 [1] publiziert. Eine revidierte Version von JCGM 200 wurde 2012 publiziert, welche kostenfrei von der BIPM-Webseite (2) erhältlich ist (*Anm. d. Übersetzers: Letzteres Dokument nur in englischer Sprache*). Diese Revision enthielt nur kleine Korrekturen, die die Begriffe, die in diesem Leitfaden beschrieben sind, nicht berühren. ISO/IEC Guide 99 wurde jedoch nicht revidiert. JCGM hat auch eine kommentierte Fassung des VIM online publiziert [3]. Es gibt viele Unterschiede zwischen dem VIM 3 und früheren Ausgaben; eine wichtige Änderung ist im Titel aufgenommen mit der Ergänzung des Wortes „Begriffe“. Der VIM 3 ist ein konsistenter Satz von Begriffen, die jeweils durch eine eindeutige Benennung beschrieben sind, der ‚Kennzeichnung‘ des Begriffes. Er ist über **alle** wissenschaftlichen Disziplinen hinweg anwendbar und daher für alle, die Messungen in der Chemie und Biologie machen, relevant. Konsistente Definitionen von Begriffen mit ihren zugehörigen Benennungen und Symbolen sind für das gegenseitige Verständnis zwischen Analytikern und Kunden rund um den Globus essentiell.

Wissenschaftler verschiedener Bereiche verwenden häufig verschiedene Wörter für denselben Begriff; was interdisziplinäre Konversation sehr schwierig machen kann. Es muss eine gemeinsame Sprache geben, die klar und unmissverständlich ist. Wenn man eine neue Sprache lernen möchte, muss man sich als erstes ein Vokabular aneignen, das mit der Zeit wächst. Jeder, der ein neue Sprache lernt, wird wissen, dass es oft Eigenheiten gibt, von Wörtern, die in unterschiedlichem Kontext verschiedene Bedeutungen haben, bis zu Wörtern, die gleich klingen, aber unterschiedlich geschrieben werden und offensichtlich eine unterschiedliche Bedeutung haben. Im Englischen wurde häufig das Wort ‚standard‘ als Beispiel für ein Wort mit vielen Bedeutungen zitiert. Eine detaillierte Kenntnis der Sprache ist notwendig, um Fehler durch solche Worte zu vermeiden, insbesondere für Personen, deren erste Sprache nicht Englisch ist. Mehrdeutige Terminologie wird auch zum Problem für Übersetzer und kann dadurch indirekt zu einer Handelsbarriere werden.

Introduction and Scope

Introduction

In the world of metrology – the science of measurement and its application – there is a language which has to be learned. The International Vocabulary of Metrology (VIM) was produced to provide a common language, primarily for physical measurements. The third edition (International Vocabulary of Metrology – Basic and General Concepts and Associated Terms (called VIM 3 in this document)) was produced by WG2 of the Joint Committee for Guides in Metrology (JCGM) and published as JCGM 200:2008 and as ISO/IEC Guide 99 [1]. A revised version of JCGM 200 was published in 2012 which is available free of charge from the BIPM website [2]. This revision included only minor corrections which do not affect the concepts described in this Guide, however ISO/IEC Guide 99 has not been updated. The JCGM has also published an online annotated version of the VIM [3]. There are many differences between VIM 3 and earlier editions; one important change is captured in the title with the addition of the word ‘concepts’. The VIM 3 is a consistent set of concepts each described by a unique term, the ‘label’ of the concept. It is applicable across **all** scientific disciplines thus making it relevant to those involved in performing measurements in chemistry and biology. Consistent definitions of concepts with their associated terms and symbols are essential if analysts and customers across the globe are to understand each other.

Scientists from different sectors often attach different words to the same concept, which can make interdisciplinary conversations difficult. There needs to be a common language that is clear and unambiguous. The first thing one does when learning any new language is to acquire a vocabulary, which will grow with time. Anyone learning a new language will know that there are often peculiarities, from words that can have different meanings depending on the context, to words that sound the same but are spelled differently and obviously have a different meaning. In English the word ‘standard’ has often been cited as an example of a word with many meanings. A detailed knowledge of the language is required so as to avoid such words causing mistakes, especially for people who do not have English as a first language. Ambiguous terminology also becomes a problem for translators and can be an indirect barrier to trade.

Weshalb brauchen wir einen Leitfaden zum VIM 3 für analytisch arbeitende Wissenschaftler? Erstens stellt der VIM eine normative Referenz in mehreren internationalen Normen dar, die der Akkreditierung zugrunde liegen, z.B. ISO/IEC 17025 [4], ISO 15189 [5], ISO/IEC 17043 [6] und ISO 17034 [7]. Er wird auch in ISO 9000 [8] zitiert. Zweitens haben diejenigen, die in Aus- und Weiterbildung tätig sind, festgestellt, dass sowohl hinsichtlich der Begriffe als auch der Terminologie Verwirrung besteht. Außerdem sind Definitionen häufig in einer Sprache geschrieben, die schwer verständlich ist. Das trifft für Analytiker auch dann zu, wenn die Definitionen vom Englischen oder Französischen in die Lokalsprache übersetzt wurden. Drittens gibt es im VIM 3 einige substantielle Änderungen in der Terminologie, um chemischen und biologischen Messungen Rechnung zu tragen. Viertens ist es notwendig, Kontext und zusätzliche Beispiele zur Verfügung zu stellen, um den VIM 3 für Analytiker, die auf diesen Gebieten arbeiten, zugänglicher zu machen.

Alle Sprachen verwenden einige Wörter auf unterschiedliche Weise, was zu Verwirrung in der Konversation zwischen unterschiedlichen Nationalitäten führt. Wie bereits erwähnt ist das Wort ‚standard‘ im Englischen ein Beispiel dafür, aber ein subtilerer Fall ist der Gebrauch des Wortes ‚Größe‘. In einer Unterhaltung können wir z.B. sagen: „Die Größe eines Balkens beträgt 5 m“. Das mag im täglichen Leben akzeptabel sein. Im VIM 3 jedoch ist die Verwendung dieses Wortes spezifischer. Was wir sagen und schreiben sollten, ist: „Die Länge des Balkens ist 5 m“. In der Metrologie ist die ‚Größe‘ kein Synonym für Länge. Größe ist ein allgemeiner Begriff für Dinge, die wir messen, z.B. Länge, Masse, Zeit und Stoffmengen-Konzentration. Validierung und Verifizierung ist ein weiteres Paar von Wörtern, die eine veränderte Definition im VIM 3 zum allgemeinen Sprachgebrauch in analytischen Laboratorien haben, obwohl die Tätigkeiten, diese Aktivitäten auszuführen, exakt dieselben sein werden.

Dieser EURACHEM Leitfaden gibt Erklärungen für ausgewählte Begriffe und liefert Beispiele zu den Anmerkungen, die im VIM 3 die Definitionen begleiten, und darüber hinaus. Die Wörter, die im VIM 3 definiert sind, sind hervorgehoben und die VIM 3 Referenznummer für den Begriff ist angegeben. Im VIM 3 sind die Beziehungen zwischen den Begriffen in 12 Diagrammen veranschaulicht, die als Hilfe dazu benutzt wurden, die Begriffe in Familien in diesem Leitfaden einzugruppieren. Wie die Benennungen und Definitionen zu diesen Begriffen miteinander verknüpft sind, entweder innerhalb einer Familie oder zwischen Familien, ist in dem vorliegenden Leitfaden illustriert.

So why do we need a guide to VIM 3 for analytical scientists? First, VIM is a normative reference in a number of International Standards, that underpin accreditation, including ISO/IEC 17025 [4], ISO 15189 [5], ISO/IEC 17043 [6] and ISO 17034 [7]. It is also referenced in ISO 9000 [8] Second, those involved with education and training have realised that often there is confusion about both concepts and terminology. In addition the strict definitions are often written in a language that is difficult to understand. This is true for analysts even when the definitions are translated from English or French to the local language. Third, in VIM 3 there are some substantial changes to terminology in an attempt to accommodate chemical and biological measurements. Fourth, to make VIM 3 more accessible to analysts working in these sectors there is a need to provide context and additional examples which relate the concepts to chemical and biochemical measurements.

All languages use some words in several different ways which adds confusion when conversations are between different nationalities. As mentioned previously, the word ‘standard’ is one example in English but a more subtle case is the use of the word ‘quantity’. In conversation we may say, e.g. ‘the quantity of sample is 5 g’. This may be acceptable in daily life. However, the VIM 3 usage of the term is more specific. What we should say and write is, ‘the mass of sample is 5 g’. In metrology quantity is not a synonym for amount. Quantity is a generic concept for things we measure, e.g. length, mass, time and amount-of-substance concentration. Validation and verification is another pair of words that have a changed definition in VIM 3 from what is generally used in analytical laboratories, although the actions in the laboratory to carry out these activities will be exactly the same.

This Eurachem Guide gives an explanation of selected concepts and provides examples over and above those in the Notes accompanying the definitions in VIM 3. The words that are defined in VIM 3 are highlighted and a VIM 3 reference number is provided for the concept. In VIM 3 the relations between concepts is displayed in 12 diagrams which have been used to help group concepts into families in this Guide. How the terms and definitions relating to these concepts are linked to each other, either within a family or between families, is illustrated in this Guide.

Die Begriffe, die in diesem Leitfaden erscheinen, sind in Tabelle A1 im Anhang aufgelistet, und der Text ist gegliedert in die folgenden Kapitel: Allgemeine Metrologie, Metrologische Rückführbarkeit, Messunsicherheit, Verifizierung, Validierung und Leistungsfähigkeit von Methoden.

Anwendungsbereich

Der Anwendungsbereich dieses EURACHEM Leitfadens umfasst eine Auswahl von Begriffen aus dem VIM 3, speziell solche, denen man in analytischen Laboratorien am ehesten begegnen wird. Chemische, biologische und klinische Messungen sollen abgedeckt werden. Der Leitfaden richtet sich an Labpersonal, an Akkreditierungsstellen, an diejenigen, die Analysen in Auftrag geben und an diejenigen, die Messergebnisse nutzen. Auch Lehrende in Aus- und Weiterbildung und diejenigen, die in Universitäten und Hochschulen lehren, könnten diesen Leitfaden nützlich finden, wenn sie metrologische Aspekte vermitteln wollen.

The concepts which appear in this Guide are listed in Table A1 in the Appendix and in the text are organised into the following chapters; General Metrology, Metrological Traceability, Measurement Uncertainty, Verification, Validation and Method Performance.

Scope

The scope of this Eurachem Guide is to cover a selection of the concepts in VIM 3, focusing on those most likely to be encountered in analytical laboratories. It aims to cover chemical, biological and clinical measurements. This Guide is intended for laboratory staff, accreditation bodies, for those commissioning measurements and for those using measurement results. Trainers, and those who teach at universities and colleges, may also find this Guide useful when teaching aspects of metrology.

Anmerkungen für den Leser

Alle im VIM 3 definierten Begriffe erscheinen **fett** gedruckt. Die Begriffe, die in diesem Leitfaden diskutiert werden, sind in Tabelle A1 im Anhang aufgelistet. Wenn die gesamte VIM 3 Definition in diesen Leitfaden aufgenommen wurde, ist die VIM 3 Referenznummer in der Textbox angegeben, in der der Begriff definiert ist und ist nicht jedes Mal genannt, wenn der Begriff im Text benutzt wird. Wenn andere Benennungen aus dem VIM 3 im Text ohne Definition benutzt werden, ist die VIM 3 Referenznummer dort angegeben, wo die Benennung zum ersten Mal in einem Abschnitt auftritt. Der VIM 3 erlaubt mehrere (oft kürzere) Benennungen für denselben Begriff. Wenn mehr als eine Benennung im VIM 3 genannt werden, ist die erste Benennung die präferierte und wird, soweit möglich, durchgehend in diesem Leitfaden verwendet. Wo es die Lesbarkeit des Textes verbessert, wird jedoch eine kürzere Alternative benutzt.

Einfache Anführungszeichen (' ') werden sowohl für die Hervorhebung als auch für Zitate verwendet. Letztere enthalten immer eine Quellenangabe. Als Dezimalzeichen wird in der deutschen Übersetzung das Komma verwendet.

Der allgemeine Begriff ‚Konzentration‘ wird allein verwendet, d.h. nicht weiter spezifiziert, wenn Allgemeingültigkeit verlangt wird. Er repräsentiert eine Familie von Begriffen wie *Massenkonzentration*, *Stoffmengenkonzentration*, *Anzahlkonzentration*, oder *Volumenkonzentration*. Beachten Sie, dass viele andere Größen, die zur Angabe der Zusammensetzung verwendet werden, wie z. B. Massenanteil und Stoffmengenanteil, direkt mit der Konzentration in Beziehung gesetzt werden können.

Es wird anerkannt, dass das Meter die SI Basiseinheit für die Länge ist, und das Volumen in m³ und Vielfachen bzw. Teilen davon ausgedrückt werden sollte, d.h. 1 Liter = 1 dm³. Da Liter eine anerkannte Einheit ist, wird sie in diesem Leitfaden benutzt und durch L repräsentiert [9].

Ein Schlüsselbegriff in diesem Leitfaden ist "Messung". Die Kerntätigkeit eines analytischen Labors wird jedoch häufig mit Begriffen wie "Analyse", "Prüfung", "Untersuchung" oder "Bestimmung" bezeichnet. Im Gegensatz zur "Messung", die ein quantitatives Merkmal ist, werden diese Begriffe häufig verwendet und so verstanden, dass sie einen qualitativen und/oder quantitativen Aspekt beinhalten.

Notes for the reader

All concepts defined in VIM 3 appear in **bold** in the text. The terms discussed in this Guide are listed in Table A1 in the Appendix. If the full VIM 3 definition is included in this Guide, the VIM 3 reference number is given in the text box where the concept is defined and is not given each time the term is used in the text. When other VIM 3 terms are used in the text without a definition, the VIM 3 reference number is given the first time the term occurs in a section. VIM 3 permits multiple (often shorter) terms for the same concept; these are included in the Appendix. If more than one term is given in VIM 3, the first term is the preferred one, and it is used in this Guide as far as possible. However, a shorter alternative is used where it improves the readability of the text.

Single quotation marks (' ') are used both for emphasis and for quotations. The latter are always referenced. The decimal sign is the point on the line. For the word standard, an upper case S is used when it refers to a norm, e.g. the International Standard ISO/IEC 17025. When the word vocabulary refers to VIM 3 or previous editions, an upper case V is used.

The generic term 'concentration' is used on its own, i.e. unqualified, when a generality is required. It represents the family of quantities which includes, *mass* concentration, *amount* concentration, *number* concentration or *volume* concentration. Note that many other quantities used to express composition, such as mass fraction and mole fraction, can be directly related to concentration.

It is accepted that the metre is the SI base unit of length, and that volume should be expressed in m³ and multiples or submultiples of this, i.e. 1 litre = 1 dm³. Since litre is an accepted unit it is used in this Guide and is represented by L [9].

A key concept in this Guide is 'measurement'. However, the core activity of an analytical laboratory is often referred to using wording such as 'analysis', 'test', 'examination' or 'determination'. Unlike 'measurement' which is a quantitative feature, these terms are frequently used, and understood, to involve a qualitative and/or a quantitative aspect.

1.0. Allgemeine Metrologie

1.1 Metrologie

Wissenschaft vom **Messen** und ihre Anwendung (VIM 2.2)

Die **Metrologie** umfasst alle theoretischen und praktischen Aspekte von **Messungen** in allen Bereichen inklusive Routinemessungen. Sie bezieht sich auf analytische Wissenschaft, auf biologische und klinische Messungen, wie auch immer der relative Beitrag der **Messunsicherheit** des Ergebnisses sein mag.

1.2 Größe

Eigenschaft eines Phänomens, eines Körpers oder einer Substanz, wobei die Eigenschaft einen Wert hat, der durch eine Zahl und eine Referenz ausgedrückt werden kann (VIM 1.1)

Die **Größe** ist ein entscheidender Begriff in der **Metrologie**, der über alle Disziplinen, die sich mit **Messungen** befassen, hinweg Anwendung findet und daher die erste Benennung ist, die im VIM 3 [1] definiert ist. Die Definition beschreibt eine **Größe** als jede Eigenschaft, die einen Wert hat. Dieser Wert wird gewöhnlich durch eine **Messung** bestimmt, kann aber auch per Definition festgelegt werden, zum Beispiel die Lichtgeschwindigkeit.

Es gibt viele Arten von **Größe** wie Masse, Volumen, Geschwindigkeit, elektrische Stromstärke und Durchflussrate. Im täglichen Leben sind wir an speziellen Beispielen solcher **Größen** (bisher ‚spezielle Größen‘ genannt) [10] interessiert, z.B. das Volumen an Benzin, mit dem ein Fahrzeug betankt wurde, die Geschwindigkeit meines Fahrzeug, als die Polizei mich anhielt, oder die Anzahlkonzentration roter Blutkörperchen in der Blutprobe, die gestern bei Herrn Schmidt genommen wurde.

Die Spezifizierung der (bestimmten) **Größe**, die wir messen wollen (auch **Messgröße** genannt) ist der erste Teil jeder **Messung**.

1.2.1 Größen der gleichen Art

Der VIM definiert den Begriff ‚**Größenart**‘ (VIM 1.2) oder ‚**Art einer Größe**‘. **Größen** gleicher **Art** werden dieselbe **Einheit** haben, aber zwei Größenwerte, die dieselbe Einheit haben, müssen nicht von gleicher **Art** sein. Die **Einheit** der Massendichte und der Massenkonzentration ist kg m^{-3} , es sind nicht **Größe**

1.0. General Metrology

1.1 Metrology

science of **measurement** and its application (VIM 2.2)

Metrology covers all theoretical and practical aspects of **measurement** in all sectors including routine measurement. It applies in analytical science, biological and clinical measurement whatever the relative magnitude of the **measurement uncertainty** of the result.

1.2 Quantity

property of a phenomenon, body, or substance, where the property has a magnitude that can be expressed as a number and a reference (VIM 1.1)

Quantity is a crucial concept in **metrology**, which applies across all disciplines involved with **measurement**, and is therefore the first term defined in VIM 3 [1]. The definition identifies a **quantity** as any property which has size (magnitude). The magnitude is usually evaluated through **measurement**, but can also be fixed by definition, for example the speed of light.

There are many kinds of **quantity** including mass, volume, velocity (speed), electric current and flow rate. In everyday life, we are interested in specific examples of such **quantities** (formerly referred to as ‘particular quantities’) [10], e.g. the volume of gasoline dispensed into a vehicle, the speed at which my car was travelling when the police stopped me, oder the number concentration of red cells in the blood sample taken yesterday from Mr. Smith.

The specification of the (particular) **quantity** we intend to measure (also called the **measurand**) is the first part of any **measurement**.

1.2.1 Quantities of the same kind

VIM defines the concept ‘**kind of quantity**’ (VIM 1.2) or ‘**kind**’. **Quantities** of the same **kind** will have the same **unit** but two **quantity values** having the same **unit** do not have to be of the same **kind**. The **unit** of mass density and of mass concentration is kg m^{-3} but these are not **quantities of the same kind**. The measurement unit of both frequency and activity of radionuclides is s^{-1} but they are not quantities of the

ßen der gleichen Art. Die Maßeinheit sowohl für Frequenz als auch für die Aktivität von Radionukliden ist s^{-1} , aber sie sind nicht **Größen gleicher Art**. In diesem Beispiel wurde den jeweiligen **Einheiten** ein spezieller Name gegeben, nämlich Hertz (Hz) und Becquerel (Bq).

1.3 Nominalmerkmal

Eigenschaft eines Phänomens, eines Körpers oder einer Substanz, die nicht quantifizierbar ist (VIM 1.30)

Die derzeitige Definition von **Größe** schließt klar Eigenschaften aus, die, obwohl sie wertvolle Informationen beinhalten, nur in Worten beschrieben werden können, wie eine Tüpfelprobe in der Chemie (z.B. eine Schiffsche Probe auf Aldehyd) und molekulare Sequenzen (z.B. Aminosäuren in einem Polypeptid, Nucleotide in einem DNA Fragment). Solche wichtigen Eigenschaften, die nicht quantifizierbar sind, werden dennoch im VIM 3 anerkannt und mit der Benennung **Nominalmerkmal** beschrieben. In der analytischen Chemie wird die Bezeichnung *qualitative Analyse* häufig zur Beschreibung der Prüfung von **Nominalmerkmalen** verwendet.

Es ist möglich, eine **Größe** zu messen (siehe Definition von **Messung**), aber die Information über ein **Nominalmerkmal** ist keine **Messung**. Die Bezeichnung *Untersuchung* ist angemessen [11]. In ISO 15189 wird jedoch die Bezeichnung ‚Untersuchung‘ sowohl für die Bestimmung von Nominalmerkmalswerten als auch für ‚Messung‘ verwendet [5].

1.4 Größenwert

Zahlenwert und Referenz, die zusammen eine **Größe** quantitativ angeben (VIM 1.19)

Der Wert (Quantität) einer **Größe** wird als Zahl mit einer Referenz ausgedrückt. Nach VIM kann die Referenz eine **Maßeinheit**, ein **Messverfahren** oder ein **Referenzmaterial (RM)** sein (VIM 1.19 Note 1).

In den meisten Fällen, die im Labor vorkommen, wird der **Größenwert** das Produkt aus einer Zahl und einer **Maßeinheit** sein, zum Beispiel:

- Die Masse einer für die Analyse entnommenen Testportion beträgt 1,0000 g;
- Die Massenkonzentration von Blei in einer Farbprobe beträgt 10 mg L⁻¹.

Es gibt jedoch Situationen, in denen sich die Referenz letztlich auf ein Messverfahren oder ein Referenzmaterial bezieht. Der VIM gibt den Wert der Rockwell-Härte C einer bestimmten Probe als Beispiel für einen Verweis auf ein Messverfahren an. Rockwell-Härtewerte werden als Zahl und mit einem Verweis auf die Härteskala angegeben (z. B. wird die Härte einer Stahlprobe mit 64 HRC angegeben).

same kind. In this example the unit in each case is given a special name, namely hertz (Hz) and becquerel (Bq), respectively.

1.3 Nominal property

property of a phenomenon, body, or substance, where the property has no magnitude (VIM 1.30)

The current definition of **quantity** clearly excludes properties that, although carrying valuable information, can only be described in words. Examples include the colour of a spot test in chemistry (e.g. a Schiff test for aldehydes), and molecular sequences (e.g. of amino acids in a polypeptide, of nucleotides in a DNA fragment). Such important properties, that have no magnitude, are however acknowledged in the VIM 3 and described with the term **nominal property**. In analytical chemistry the term *qualitative analysis* is often used to describe the examination of **nominal properties**.

It is possible to measure a **quantity** (see the definition of **measurement**), whereas obtaining information about a **nominal property** is not a **measurement**. The term *examination* is appropriate [11]. However, in ISO 15189 the term ‘examination’ is used both for the determination of **nominal property values** and for **measurement** [5].

1.4 Quantity value

number and reference together expressing magnitude of a **quantity** (VIM 1.19)

The size (magnitude) of a **quantity** is expressed as a number accompanied by a reference. According to VIM, the reference can be a **measurement unit**, a **measurement procedure** or a **reference material (RM)** (VIM 1.19 Note 1).

In the majority of cases encountered in the laboratory, the **quantity value** will be the product of a number and a **measurement unit**, for example:

- The mass of a test portion take for analysis is 1.0000 g;
- The mass concentration of lead in a sample of paint is 10 mg L⁻¹.

However, there are situations where the reference is ultimately to a measurement procedure or a reference material. VIM gives the value of Rockwell C hardness of a given sample as an example of reference to a measurement procedure. Rockwell hardness values are reported as a number and a reference to the hardness scale (e.g. the hardness of a sample of steel is reported as 64 HRC).

Die Skala wird durch das verwendete Messverfahren definiert. Bei einer Rockwell-Härteprüfung muss eine bestimmte Kraft mit einem bestimmten Eindringkörper auf eine Probe ausgeübt werden. Es gibt verschiedene Rockwell-Skalen (bezeichnet mit A bis V), die jeweils eine bestimmte Kraft und einen bestimmten Eindringkörper aufweisen. Das Messverfahren ist durch ISO [12] und ASTM [13] festgelegt.

In einigen Fällen basiert die verwendete Einheit auf dem Wert eines RM. Dies kann anhand eines Beispiels aus der Labormedizin veranschaulicht werden. Der Größenwert der Aktivität einer Charge eines gerinnungshemmenden Faktors, Faktor VIII, der aus menschlichem Blut extrahiert wird, wird zunächst in Internationalen Einheiten (IE) pro Volumeneinheit ausgedrückt*, z. B. 68 IE dL⁻¹. Die Internationale Einheit wird durch Bezugnahme auf ein entsprechendes RM definiert, das in regelmäßigen Abständen von der WHO hergestellt und geprüft wird und als Internationaler Standard der WHO bezeichnet wird [14]. Der derzeitige Internationale Standard hat einen zugewiesenen Wert von 9,4 IE pro Ampulle. Dies kann rekonstituiert werden, um 1 ml einer Kalibrier-Stammlösung mit 9,4 IE mL⁻¹ zu erhalten, die zur Kalibrierung oder zur Herstellung von Kalibrierstandards des Kit-Herstellers verwendet wird.

1.5 Nennwert

gerundeter angenäherter **Wert** einer charakteristischen **Größe** eines **Messgeräts** oder **Messsystems**, der auf dessen sachgemäßen Gebrauch hinweist (VIM 4.6)

Im VIM 3 wird das englische Wort 'nominal' in **nominal quantity value (Nennwert)** und **nominal property (Nominalmerkmal)** unterschiedlich verwendet (siehe Abschnitt 1.3).

Ein Messkolben kann als 100 mL-Kolben gekennzeichnet sein, das ist der **Nennwert**. Der tatsächliche Wert des Kolbens ist möglicherweise nicht exakt 100,00 ml, aber wird in einen Bereich fallen, der durch die Genauigkeitsklasse definiert ist. Wenn zum Beispiel ein 100 mL Messkolben der Klasse A eine Toleranz von 0,08 mL hat, wird das tatsächliche Volumen im Bereich 99,92 mL bis 100,08 mL liegen.

The scale is defined by the measurement procedure used. A Rockwell hardness test requires a particular load to be applied to a test sample using a specified indenter. There are different Rockwell scales (labelled A to V) each with a specified load and indenter. The measurement procedure is defined by ISO [12] and ASTM [13].

In some cases the unit used is based on the value of an RM. This can be illustrated using an example from laboratory medicine. The quantity value of the activity of a batch of an anticoagulant factor, Factor VIII, extracted from human blood, is initially expressed** in International Units (IU) per unit volume; for example, 68 IU dL⁻¹. The International Unit is defined by reference to the corresponding RM, periodically prepared and approved by WHO and known as a WHO International standard [14]. The present International Standard has an assigned value of 9.4 IU per ampoule. This can be reconstituted to give 1 mL of a stock calibration solution containing 9.4 IU mL⁻¹, which is used to calibrate or prepare kit manufacturer's calibration standards.

1.5 Nominal quantity value

rounded or approximate **value** of a characterizing **quantity** of a **measuring instrument** or **measuring system** that provides guidance for its appropriate use (VIM 4.6)

In VIM 3 the word 'nominal' is used in a different sense in **nominal quantity value** and **nominal property** (see section 1.3).

A volumetric flask may be marked 100 mL, this is its **nominal quantity value** (or, more simply the **nominal value**). The actual value of the volume of the flask may not be exactly 100.00 mL, but will fall in a range according to the glassware class. For example, if a class A 100 mL volumetric flask has a tolerance of 0.08 mL the actual volume will lie in the range 99.92 mL to 100.08 mL.

* Für Kliniker wird die Aktivität in der Regel in einen Prozentsatz des Normalwerts für gesunde Patienten umgerechnet.

* For clinicians, the activity is usually converted to a percentage of the normal level for healthy patients.

1.6 Referenzwert

Größenwert, der als Grundlage für den Vergleich mit Werten von **Größen** der gleichen **Art** verwendet wird. (VIM 5.18)

Viele verschiedene Typen von Materialien und Einrichtungen können einen **Referenzwert** und eine zugeordnete **Messunsicherheit** haben. Nachfolgend einige Beispiele.

- Der **Größenwert** der auf dem Zertifikat eines **zertifizierten Referenzmaterials (ZRM)** (VIM 5.14) angegeben ist, ist ein **Referenzwert** für die bestimmte Eigenschaft, zu der er gehört.
- Die Werte eines Satzes von Lösungen bekannter Konzentration, die zur Aufstellung eines **Kalibrierdiagramms** (VIM 4.30) gemessen werden, sind **Referenzwerte**, die zur Bestimmung von Werten derselben **Größe** in anderen Proben verwendet wird
- In einem Kalibrierlabor werden Quecksilber-Glas-thermometer gegen ein **Messnormal** (Thermometer) kalibriert, das bestimmte Temperaturwerte (mit den dazugehörigen **Unsicherheiten**) wiedergibt: dies sind **Referenzwerte** für die **Größe** "Temperatur".
- Analytiker verwenden den einem **ZRM** zugewiesenen Wert als **Referenzwert** für die Bewertung der **Richtigkeit** eines **Messverfahrens**.
- Um die Kompetenz des Personals oder eines Laboratoriums bewerten zu können, kann das Personal gefordert sein, eine Probe zu analysieren, die einen zugewiesenen Wert hat. Der Wert, der der Probe zugewiesen wurde, kann entweder ein **Größenwert** sein, der in früheren Analysen von erfahrenerem Personal oder Laboratorium ermittelt wurde, der aus einem Eignungstest-Ringversuch oder von einem Zertifikat stammt, wenn die Probe ein **ZRM** ist. In diesem Zusammenhang wird der Wert, der einem dieser Materialien zugewiesen wurde, als **Referenzwert** betrachtet.

1.7 Größensystem

Menge von **Größen** zusammen mit einer Menge von widerspruchsfreien Gleichungen, die diese Größen zueinander in Beziehung setzen (VIM 1.3)

In der Praxis ist es nützlich, einen Satz von **Größen** zu definieren, von dem alle anderen **Größen** abgeleitet werden können. Ein solcher Satz ist ein **Größensystem**.

1.6 Reference quantity value

quantity value used as a basis for comparison with values of **quantities** of the same **kind** (VIM 5.18)

Many different types of materials and devices may have a **reference quantity value** and an associated **measurement uncertainty**. Some examples are given below.

- The **quantity value** given on the certificate of a **certified reference material (CRM)** (VIM 5.14) with its associated **measurement uncertainty** is a **reference quantity value** for the particular property to which it relates.
- The values of a set of solutions of known concentration, analysed to build a **calibration diagram** (VIM 4.30), are **reference quantity values** used for determining the value of the same **quantity** in other samples.
- In a calibration laboratory, mercury-in-glass thermometers are calibrated against a **measurement standard** (thermometer) reproducing specific temperature values (with associated **uncertainties**): these are **reference values** of the **quantity** 'temperature'.
- Analysts use the value assigned to a **CRM** as a **reference quantity value** for the assessment of the **trueness** of a **measurement procedure**.
- In order to assess the competence of staff and laboratories, the staff may be required to analyse samples which have assigned values. The value assigned to a sample may be a **quantity value** obtained either from previous analyses by more experienced staff/laboratories or from PT rounds, or from a certificate if the sample is a **CRM**. In this context, the value assigned to any of these materials is deemed to be a **reference quantity value**.

1.7 System of quantities

set of **quantities** together with a set of non-contradictory equations relating those quantities (VIM 1.3)

In practice, it is useful to identify a set of **quantities** from which all other **quantities** can be derived. Such a set is a **system of quantities**.

In jedem **Größensystem** wird angenommen, dass die **Basisgrößen** (VIM 1.4), die den Satz begründen, per Definition unabhängig voneinander sind – sie können nicht als Produkt anderer **Basisgrößen** beschrieben werden. Die Wahl dieser **Größen** beruht auf Konvention. Eine andere Wahl wäre gleichermaßen gültig, vorausgesetzt, dass sie der Definition genügen würde.

Man hat sich jedoch auf ein spezielles **Größensystem** geeinigt und es eingeführt. Die Meterkonvention etablierte eine permanente Organisationsstruktur für Mitgliedsstaaten, um übereinstimmend in allen Angelegenheiten der **Maßeinheiten** handeln zu können. Das führte zur Gründung des Internationalen Büros für Maß und Gewicht (BIPM). Die sieben Basisgrößen, die die Generalkonferenz für Maß und Gewicht (CGPM) genehmigte und definierte, sind in Tabelle 1 dargestellt. Dies wird das **Internationale Größensystem** [9] genannt.

1.8 Internationales Größensystem

Größensystem auf der Grundlage der sieben **Basisgrößen** Länge, Masse, Zeit, elektrische Stromstärke, thermodynamische Temperatur, Stoffmenge und Lichtstärke. (VIM 1.6)

Die Definition der Einheiten, die mit den **Basisgrößen** (VIM 1.4) korrespondieren, ist extrem wichtig, da sie das Fundament des gesamten **Einheitensystems** (VIM 1.13) bilden. Das **Internationale Einheitensystem** (VIM 1.16), das **SI**, ist von vielen Ländern anerkannt (zum Zeitpunkt der Erstellung dieses Berichts gibt es 64 Mitgliedsstaaten der Meterkonvention) und ist in der Europäischen Union das einzige, gesetzlich anerkannte **Einheitensystem**, [9, 15]. Die Basisgrößen und die korrespondierenden **Basiseinheiten** (VIM 1.10) sind in Tabelle 1 aufgeführt.

Im Jahr 2018 wurde vereinbart, dass vier dieser **Basiseinheiten** neu definiert werden - das Kilogramm, das Mol, das Ampere und das Kelvin. Seit der Annahme der überarbeiteten Definitionen im Mai 2019 werden alle **Basiseinheiten** in Form von zeitlich und örtlich unveränderten Naturkonstanten definiert. Diese fundamentalen Konstanten haben definitionsgemäß keine **Unsicherheit**. Das Kilogramm ist definiert durch die Planck-Konstante $h = 6,626\ 070\ 15 \times 10^{-34}$ J s und das Mol als die spezifische Anzahl der Elementarteilchen (Atome, Moleküle, Ionen usw.), die durch die Avogadro-Konstante $N_A = 6,022\ 140\ 76 \times 10^{23}$ mol⁻¹ gegeben ist. Diese Änderungen haben keinen Einfluss auf die Art und Weise, wie **Messungen** in der Routine durchgeführt werden, und die **messtechnische Rückführbarkeit** wird genau wie bisher gewährleistet. Lediglich die Definition der Einheiten hat sich geändert.

In any **system of quantities** the **base quantities** (VIM 1.4) that constitute the set are, by definition, considered to be mutually independent – they cannot be described as a product of other **base quantities**. The choice of these **quantities** is by convention. Other choices are equally valid, provided that they satisfy the definition.

However, a specific **system of quantities** has been agreed and adopted. The Metre Convention established a permanent organisational structure for member governments to act in common accord on all matters relating to **units of measurement**. It led to the creation of the International Bureau of Weights and Measures (BIPM). The seven **base quantities**, which are agreed and defined by the General Conference on Weights and Measures (CGPM), are shown in Table 1. This is called the **International System of Quantities** [9].

1.8 International System of Quantities

system of quantities based on the seven **base quantities**: length, mass, time, electric current, thermodynamic temperature, amount of substance, and luminous intensity (VIM 1.6)

The definition of the units corresponding to the **base quantities** (VIM 1.4) is extremely important since they provide the foundation for the entire **system of units** (VIM 1.13). The **International System of Units** (VIM 1.16), the **SI**, is recognised by many countries (at the time of writing there are 64 members states of the Metre Convention) and is adopted as the only legal **system of units** within the European Union [9, 15]. The **base quantities** and their corresponding **base units** (VIM 1.10) are shown in Table 1.

In 2018 it was agreed that four of these **base units** would be redefined – the kilogram, the mole, the ampere and the kelvin. Following the adoption of the revised definitions in May 2019, all the **base units** are defined in terms of fundamental constants which are unchanged with respect to time and location. By definition, these fundamental constants have no **uncertainty**. The kilogram is defined in terms of the Planck constant $h = 6.626\ 070\ 15 \times 10^{-34}$ J s and the mole as the specific number of elementary entities (atoms, molecules, ions, etc.) given by the Avogadro constant $N_A = 6.022\ 140\ 76 \times 10^{23}$ mol⁻¹. These changes do not affect the way routine **measurements** are made and **metrological traceability** is obtained exactly as before. It is only the definition of the **units** that has changed.

Viele andere **Größen** innerhalb des **SI** werden als Beziehungen zwischen den in Tabelle 1 aufgeführten Größen ausgedrückt und **abgeleitete Größen** (VIM 1.5) genannt. Die Definitionen der **abgeleiteten Einheiten** (VIM 1.11) hinsichtlich der **Basiseinheiten** ergeben sich aus den Definitionen der **abgeleiteten Größen** hinsichtlich der **Basisgrößen**. Zum Beispiel ist die **abgeleitete Größe** Massendichte (ρ):

$$\rho = \frac{m}{V}$$

wobei m die Masse (ausgedrückt in kg) und V das Volumen (ausgedrückt in m^3) ist.

Die **Maßeinheit (abgeleitete Einheit)** erhält man durch Anwendung derselben Formel auf die Einheiten, d.h. $\frac{kg}{m^3}$, was üblicherweise $kg\ m^{-3}$ oder kg/m^3 geschrieben wird.

Tabelle 1 Basisgrößen und Basiseinheiten.

Basisgröße	Basiseinheit (Symbol)
Länge	Meter (m)
Masse	Kilogramm (kg)
Zeit	Sekunde (s)
Elektrische Stromstärke	Ampere (A)
Thermodynamische Temperatur	Kelvin (K)
Stoffmenge	Mol (mol)
Lichtstärke	Candela (cd)

Ein häufiger Fehler ist, **Größen** und ihre **Maßeinheiten** zu verwechseln. Man sollte bedenken, dass, während eine **Größe** eine messbare Eigenschaft eines Phänomens, eines Körpers oder einer Substanz (z.B. Masse) ist, die **Maßeinheit** (z.B. das Kilogramm) per Konvention als Referenz gewählt wurde, auf die sich **Messungen** dieser Eigenschaft beziehen. So entspricht es beispielsweise nicht dem empfohlenen **SI**-Gebrauch, eine **Messgröße** als "Anzahl an Molen" zu beschreiben. In diesem Fall ist die **Größe** die "Stoffmenge", und die **Einheit** ist das Mol.

1.9 Maßeinheit

reelle skalare **Größe**, durch Vereinbarung definiert und angenommen, mit der jede andere Größe gleicher **Art** verglichen werden kann, um das Verhältnis der beiden Größen als Zahl auszudrücken (VIM 1.9)

Wir sind alle mit dem Begriff einer **Maßeinheit** vertraut; für die Preisauszeichnung vieler Produkte werden die Kosten pro festgesetzter Einheit angegeben, z.B. für Lebensmittel Kosten pro kg, der Preis für Benzin pro Liter (L). Wenn wir sagen, dass die Masse eines Apfels 0,15 kg beträgt, dann bedeutet das, dass die Masse des Apfels das 0,15fache der Masse des Kilogramms, d.h. der Maßeinheit, ist. Um die Zahl 0,15 zu erhalten, muss man den für den Apfel ange-

Many other **quantities** within the **SI** are expressed as relations between those shown in Table 1 and are called **derived quantities** (VIM 1.5). The definitions of the **derived units** (VIM 1.11) in terms of the **base units** follow from the equations defining the **derived quantities** in terms of the **base quantities**. For example, the **derived quantity** mass density (ρ) is:

$$\rho = \frac{m}{V}$$

where m is mass (expressed in kg) and V is volume (expressed in m^3).

The **measurement unit (derived unit)** is obtained by applying the same formula to the units, i.e. $\frac{kg}{m^3}$ which is usually written as $kg\ m^{-3}$ or kg/m^3 .

Table 1 Base quantities and base units.

Base quantity	Base unit (symbol)
Length	metre (m)
Mass	kilogram (kg)
Time	second (s)
electric current	ampere (A)
thermodynamic temperature	kelvin (K)
amount of substance	mole (mol)
luminous intensity	candela (cd)

A common mistake is to confuse **quantities** and their **measurement units**. It should be kept in mind that whereas a **quantity** is a measurable property of a phenomenon, body or substance (e.g. mass), a **measurement unit** (e.g. the kilogram) is chosen by convention as the reference to which **measurements** of that property refer. For example, it is not consistent with recommended **SI** usage to describe a **measurement** as 'number of moles'. In this instance, the **quantity** is 'amount of substance', and the **unit** is the mole.

1.9 Measurement unit

real scalar **quantity**, defined and adopted by convention, with which any other quantity of the same **kind** can be compared to express the ratio of the two quantities as a number (VIM 1.9)

We are all familiar with the concept of a **measurement unit**; the method of pricing many products is by showing the cost per agreed unit, e.g. food as cost per kg, price of gasoline quoted per litre (L). If we say the mass of an apple is 0.15 kg, this means that the mass of the apple is 0.15 x mass of the kilogram, that is, the **measurement unit**. To obtain the number 0.15

zeigten Wert mit dem für eine Referenzmasse angezeigten Wert vergleichen, d.h. mit der Masse, die für die Kalibrierung der Waage verwendet wurde. Die Referenzmasse wird wiederum mit einer praktischen Realisierung der Definition des Kilogramms durch nationale Metrologieinstitute (NMIs) oder durch Kalibrier- oder Prüflaboratorien verglichen. Das Ergebnis eines solchen Vergleiches wird als Verhältnis der erhaltenen Anzeige zum Wert einer Größe der gleichen Art ausgedrückt (VIM 1.2).

1.10 Messung

Prozess, bei dem einer oder mehrere **Größenwerte**, die vernünftigerweise einer **Größe** zugewiesen werden können, experimentell ermittelt werden (VIM 2.1)

Eine **Messung** ist eine Folge von Handlungen (Schritte, Stufen), die in einer definierten Weise ablaufen (d.h. einem **Messverfahren** folgen). Einige **Messungen** bestehen aus einem Schritt, andere haben viele Stufen. Es gibt hier ein Potential für Meinungsverschiedenheiten, da einige eine **Messung** als die Antwort eines Instruments auffassen, oft der letzte Schritt eines mehrstufigen Prozesses, z.B. für ein Aliquot des Probenextrakts. Was klar ist, ist, dass sich eine **Messung** auf den *gesamten* Prozess der Gewinnung eines **Größenwerts** bezieht und nicht benutzt werden sollte, um den erhaltenen Zahlenwert zu bezeichnen.

1.10.1 Was ist eine 'Messung' und was nicht?

In der Analytik wird eine Probe, die zur Analyse abgegeben wurde, häufig einer Serie von chemischen und/oder physikalischen Behandlungen unterzogen, um sie in eine Form zu bringen, in der man sie in ein **Messinstrument** geben kann. Diese Schritte werden als Teil des Messprozesses aufgefasst. In einigen Fällen kann auch ein spezielles Probenahmeverfahren in den Prozess einbezogen werden.

Ein **Größenwert** wird als Zahl mit einer Referenz ausgedrückt, um die Quantität der **Größe** auszudrücken. Heißt das, dass der Vorgang des Zählens von Gegenständen eine **Messung** ist? Die Antwort ist ja, weil das Ergebnis quantitativ und die Einheit die gezählte Entität ist. Aber die visuelle Inspektion einer Probe zur Feststellung ihrer Farbe ist keine **Messung**, sondern eine 'Untersuchung', da ein **Nominalmerkmal** nicht gemessen werden kann. (Im Gegensatz dazu ist die Verwendung eines Spektrophotometers zur Aufzeichnung einiger Eigenschaften im Zusammenhang mit der Farbe einer Probe (z.B. die Absorption bei einer bestimmten Wellenlänge) eine **Messung**).

you compare the value indicated for the apple with that indicated for a reference mass, i.e. the mass used to calibrate the balance. The reference mass in turn is compared with a practical realization of the definition of the kilogram by national metrology institutes (NMIs), or by calibration or testing laboratories. The result of any such comparison is expressed as a ratio of the **indication** obtained to the value of a **quantity** of the same **kind** (VIM 1.2).

1.10 Measurement

process of experimentally obtaining one or more **quantity values** that can reasonably be attributed to a **quantity** (VIM 2.1)

A **measurement** is a series of actions (steps, stages) taking place in a defined manner (i.e. following a **measurement procedure**). Some **measurements** are a single step, others have many stages. There is potential for controversy as some regard **measurement** as the instrument response, often the last stage in a multistage process, e.g. for an aliquot of sample extract. What is clear is that **measurement** relates to the *whole* process of obtaining a **quantity value** and should not be used to refer to the numerical value obtained.

1.10.1 What is a 'measurement' and what is not?

In analytical sciences, a test sample submitted for analysis often undergoes a series of chemical and/or physical treatments in order to convert it to a form that can be presented to a **measuring instrument**. These steps are acknowledged to be part of the measurement process. In some cases there may be a particular sampling procedure included in the process.

A **quantity value** is expressed as a number and a reference, expressing the magnitude of the **quantity**. Does this mean that the procedure of counting items is a **measurement**? The answer is yes, because the result is quantitative and the **unit** is the entity counted. However, visually inspecting a sample to note its colour is not a **measurement**, but an 'examination', as **measurement** does not apply to **nominal properties**. (In contrast, using a spectrophotometer to record some property relating to the colour of a sample (e.g. absorbance at a particular wavelength) is a **measurement**).

1.10.2 Vorbereitung einer Messung

Bevor eine **Messung** gemacht werden kann, muss die **Größe** klar definiert sein, wobei der Zweck, für den das experimentelle Ergebnis genutzt werden soll, berücksichtigt werden muss. Die genannte **Größe** ist die **Messgröße**. Zusätzlich muss ein validiertes **Messverfahren** verfügbar sein, damit das **Messergebnis** für den Zweck geeignet ist, und es muss ein kalibriertes **Messsystem** verwendet werden. In diesem Zusammenhang bedeutet „für den Zweck geeignet“, dass das **Messverfahren** misst, was gemessen werden soll und die **Unsicherheit** des **Messergebnisses** akzeptabel ist. Das Konzept des **Höchstwerts der Messunsicherheit** (Zielmessunsicherheit) (VIM 2.34) (siehe Abschnitt 3.1.2) wird verwendet, um die maximale **Messunsicherheit** zu beschreiben, die vom Kunden für eine bestimmte Anwendung akzeptiert werden kann [16].

1.11 Messgröße

Größe, die gemessen werden soll (VIM 2.3)

Es steckt sehr viel hinter dieser scheinbar einfachen Definition. Die **Messgröße** ist die Beschreibung der spezifischen **Größe**, die wir messen wollen. Die Spezifikation der **Messgröße** sollte so detailliert sein, dass jede Doppeldeutigkeit vermieden wird. **Messgröße** ist nicht ein anderer Name für Analyt. Der Analyt ist die Komponente, die im Namen der messbaren **Größe** repräsentiert wird, wohingegen sich die **Messgröße** auf eine spezifische **Größe** bezieht, von der wir erwarten, dass wir ihr **Größenwerte** durch eine **Messung** zuweisen können. Wir betrachten dazu zwei Beispiele von **Größen**, die gemessen werden können:

- Masse an Protein in einer 24-Stunden Urin-Sammelprobe
- Stoffmengenkonzentration von Glukose in Plasma

In beiden Fällen repräsentiert die gesamte Aussage die Messgröße. Die Analyten sind Protein bzw. Glukose.

1.10.2 Preliminary to making a measurement

Before making a **measurement**, the **quantity** must be clearly defined, bearing in mind the purpose for which the experimental result is required. The **quantity** referred to is the **measurand**. In addition, for **measurement results** to be fit for purpose, a validated **measurement procedure** needs to be available and must be applied using a calibrated **measuring system**. In this context ‘fit for purpose’ means that, when the **measurement procedure** is applied, the quantity intended to be measured is measured and the **uncertainty** in the **measurement results** is acceptable. The concept of **target measurement uncertainty** (VIM 2.34) (see section 3.1.2) is used to describe the maximum **measurement uncertainty** that can be accepted by the customer for a specific application [16].

1.11 Measurand

quantity intended to be measured (VIM 2.3)

There is a great deal behind this apparently simple definition. The **measurand** is a description of the specific **quantity** we intend to measure. The specification of the **measurand** should be sufficiently detailed to avoid any ambiguity. **Measurand** is not another name for analyte. Analyte is the component represented in the name of a measurable **quantity**, whereas **measurand** refers to a specific **quantity** to which **quantity values** are expected to be attributed by means of a **measurement**. Consider two examples of **quantities** which may be measured:

- mass of protein in a 24-hour urine collection
- amount of substance concentration of glucose in plasma.

In each case the complete statement represents the **measurand**. The analytes are protein and glucose, respectively.

Die Spezifizierung der **Messgröße** ist kritisch in Bezug darauf, dass das **Messergebnis** für den beabsichtigten Gebrauch geeignet ist und sollte alle wichtigen Parameter und Bedingungen beinhalten. Wenn z.B. das Volumen der von einer Pipette abgegebenen Flüssigkeit durch Wägung bestimmt werden muss, dann sollte die Spezifikation der **Messgröße** zumindest die Art der verwendeten Flüssigkeit, die verwendet werden muss, beinhalten und die Temperatur, bei der die **Messungen** ausgeführt werden müssen. Bei chemischen und biologischen Analysen erfordert die Spezifikation der **Messgröße** zumindest die Beschreibung der **Größe** (z.B. Massenanteil oder Stoffmengenkonzentration), den Analyten und, wo nötig, die Matrix, auch wenn es nicht möglich sein sollte, eine klare chemische Definition des Analyten zu geben, zum Beispiel:

- Massenanteil (ausgedrückt z.B. in mg kg⁻¹) von Cadmium in Boden;
- Stoffmengenkonzentration (ausgedrückt z.B. in mol L⁻¹) von Cholesterin in Blutserum;
- Massenanteil (ausgedrückt z.B. in g kg⁻¹) von extrahierbarem Fett in einer Fleischprobe.

In einigen Fällen kann die **Messgröße** nur unter Bezugnahme auf ein vereinbartes **Messverfahren** definiert werden. Eine solche **Messgröße** wird manchmal als „Konventions-Messgröße“ bezeichnet [7]. Andere Begriffe sind „methodendefinierte Messgrößen“, „definierende Methode“ und „empirische Methode“ (im Gegensatz zu einer „rationalen Methode“ [17]). Standardverfahren fallen oft in diese Kategorie. In diesem Leitfaden verwenden wir den Begriff „operativ definierte Messgröße“, um anzuzeigen, dass eine Messgröße durch Bezugnahme auf ein bestimmtes Verfahren definiert ist. Beispielsweise sollten bei der **Messung** des Massenanteil von Cadmium in einer Bodenprobe die Probentrocknungsbedingungen (z.B. getrocknet bis zur Massenkonstanz bei (105 ± 5) °C) in die Definition der **Messgröße** einbezogen werden, da sie einen Einfluss haben auf die Grundlage zur Angabe des Ergebnisses. Ein weiteres Beispiel ist die Bestimmung der Massenkonzentration von Blei, das aus der Farbe eines Spielzeugs extrahiert wurde, nach dem in der Europäischen Norm EN 71-3 „Sicherheit von Spielzeug - Migration bestimmter Elemente“ [18] beschriebenen **Messverfahren**. Da die Menge des extrahierten Bleis von der angewandten Behandlung (z. B. Lösemittel, Zeit, Temperatur) abhängt, wird die **Messgröße** durch das angewandte **Messverfahren** definiert. Ein anderes **Messverfahren** würde wahrscheinlich ein anderes Ergebnis liefern.

Solche „operativ definierten“ Messgrößen sind immer noch geeignet, um Ergebnisse zu vergleichen und Entscheidungen zu treffen, vorausgesetzt, die vereinbarten **Messverfahren** werden strikt eingehalten.

The specification of the **measurand** is critical, in order that the **measurement result** is suitable for its intended use, and should include all important parameters and conditions. For example, if the volume of the liquid delivered by a pipette is to be determined by weighing, the specification of the **measurand** should at least include the type of liquid to be used and the temperature at which the **measurements** should be carried out. In chemical and biological analysis the specification of the **measurand** requires at least the description of the **quantity** (e.g. mass fraction or amount of substance concentration), the analyte and where relevant the matrix, even if it is not possible to give a clear chemical definition of the analyte, for example:

- mass fraction (expressed in, e.g. mg kg⁻¹) of cadmium in soil;
- amount of substance concentration (expressed in, e.g. mol L⁻¹) of total cholesterol in blood serum;
- mass fraction (expressed in, e.g. g kg⁻¹) of extractable fat in a meat sample.

In some cases, the **measurand** can only be defined with reference to an agreed **measurement procedure**. Such a **measurand** is sometimes called an ‘operationally defined **measurand**’ [7]. Other terms include ‘method-defined **measurands**’, ‘defining method’ and ‘empirical method’ (as opposed to a ‘rational method’ [17]). Standard methods often fall into this category. In this Guide, we use ‘operationally defined **measurand**’ to indicate where a **measurand** is defined by reference to a particular procedure. For example, in the **measurement** of the mass fraction of cadmium in a soil sample, the sample drying conditions (e.g. dried to constant mass at (105 ± 5) °C) should be included in the definition of the **measurand** as they have an influence on the basis for reporting results. Another example is the determination of the mass concentration of lead extracted from the paint on a toy following the **measurement procedure** described in European Standard EN 71-3 ‘Safety of Toys. Migration of certain elements’ [18]. Since the amount of extracted lead is dependent on the treatment applied (e.g. solvent, time, temperature), the **measurand** is defined by the **measurement procedure** applied. A different **measurement procedure** would probably give a different result.

Such ‘operationally defined’ **measurands** are still fit for the purpose of comparing results and making decisions provided that the agreed **measurement procedures** are strictly followed.

Es kann notwendig sein, das **Messverfahren** noch detaillierter zu spezifizieren und zu definieren, ob sich das **Messergebnis** auf die Laborprobe oder die Gesamtmenge (z.B. eine Charge Tierfutter, den gesamten See) bezieht.

1.12 Messverfahren

detaillierte Beschreibung einer **Messung** gemäß einem oder mehreren **Messprinzipien** und einer **Messmethode** auf der Grundlage eines **Modells der Messung** und einschließlich aller Berechnungen zum Erhalt eines **Messergebnisses** (VIM 2.6)

Die Beschreibung, wie **Messungen** durchgeführt werden, kann in unterschiedlichem Detaillierungsgrad erfolgen. Das Umfassendste ist das **Messverfahren**, das alle anderen Stufen beinhaltet.

Messungen durchzuführen erfordert ein Verständnis des **Messprinzips** (VIM 2.4), d.h. des Phänomens, das der **Messung** zugrunde liegt.

Dasselbe **Messprinzip** kann in verschiedenen **Messmethoden** (VIM 2.5) angewandt werden, z. B. mit verschiedenen Techniken (wie Flammen- oder elektrothermische Atomabsorptionsspektrometrie) oder verschiedenen **Kalibrierverfahren** (externe **Kalibrierung** oder durch das „Verfahren der Standardaddition“). Die **Messmethode** ist eine allgemeine Beschreibung der betreffenden Vorgänge. Nachfolgend sind Beispiele für **Messmethoden** aufgeführt, wobei das **Messprinzip** in Klammern angegeben ist.

- Bestimmung durch Wägung der aus einer flüssigen Probe ausgefallenen Menge einer chemischen Verbindung durch Nutzung einer definierten chemischen Reaktion (Gravimetrie).
- Bestimmung der Stoffmengenkonzentration einer Verbindung in einer gegebenen Probe, entweder durch direkte Messung des Absorptionsvermögens bei einer gegebenen Wellenlänge oder durch Messung einer sogenannten ‚Ersatzgröße‘, wie des Absorptionsvermögens eines Komplexes, gebildet aus einer definierten chemischen Reaktion (Spektrophotometrie).
- Bestimmung der Stoffmengenkonzentration einer Verbindung über ihre Fähigkeit, sich permanent an einen spezifischen Antikörper zu binden, der eine Kennung trägt (Immunochemie).

It may be necessary to specify the **measurement procedure** in even more detail and define whether the **measurement result** will be referring to the laboratory sample or the whole bulk (e.g. a batch of animal feeding stuff, entire lake).

1.12 Measurement procedure

detailed description of a **measurement** according to one or more **measurement principles** and to a given **measurement method**, based on a **measurement model** and including any calculation to obtain a **measurement result** (VIM 2.6)

The description of how **measurements** are performed involves several levels of detail, with the most comprehensive being the **measurement procedure**, which encompasses all others.

Performing **measurements** requires an understanding of the **measurement principle** (VIM 2.4), that is of the phenomenon underlying the **measurement**.

The same **measurement principle** can be applied according to different **measurement methods** (VIM 2.5), e.g. using different techniques (such as flame or electrothermal atomic absorption spectrometry), or different **calibration procedures** (external **calibration** or by the ‘method of standard additions’). The **measurement method** is a generic description of the operations involved. The following are examples of **measurement methods**, with the **measurement principle** given in brackets.

- Determining by weighing the amount of a chemical compound precipitated from a liquid test sample using a defined chemical reaction (gravimetry).
- Determining the amount-of-substance concentration of a compound in a given sample, either, by measuring directly its absorbance at a given wavelength, or by measuring a so-called ‘surrogate quantity’, such as the absorbance of a complex formed as a result of a defined chemical reaction (spectrophotometry).
- Determining the amount-of-substance concentration of a compound by means of its ability to become permanently linked to a specific antibody carrying a tag (immunochemistry).

Obwohl in VIM 3 nicht definiert, wird der Begriff „Messprozess“ in einer Reihe von internationalen Normen verwendet. In ISO 9000 [8] ist er definiert als „eine Reihe von Vorgängen zur Bestimmung des Wertes einer Größe“. Da die VIM die Messung jedoch als Prozess definiert, können der Begriff „Messprozess“ in ISO 9000 und der Begriff „**Messung**“ in der VIM in der Regel als synonym betrachtet werden. Es handelt sich um den Gesamtprozess der Durchführung und Auswertung von **Messungen**, und als solche sind das **Messprinzip**, die **Methode** und das **Verfahren** Teil des Messprozesses.

Der vollständigste Grad der Beschreibung einer **Messung** ist das **Messverfahren**, das so detailliert sein sollte, dass eine angemessen ausgebildete Person in der Lage sein sollte, die **Messung** durchzuführen. In manchen Laboratorien kann das **Messverfahren** in einer oder mehreren Standardarbeitsanweisungen (SOP) dokumentiert sein. Obwohl ISO/IEC 17025 [4] sich in manchen Abschnitten auf **Messverfahren** bezieht, wird (Anm. des Übersetzers: in der englischen Fassung) ‚Methode‘ und ‚Prüfmethode‘ benutzt und als synonym mit **Messverfahren** betrachtet, wie sie in VIM 3 definiert sind. In der deutschen Fassung wird eine andere Benennung, das ‚Prüfverfahren‘ für das **Messverfahren** verwendet. Es sollte jedoch beachtet werden, dass sich die Anforderungen der Norm sowohl auf **Messungen** als auch auf Untersuchungen beziehen. Wie bereits erwähnt, benutzt ISO 15189 [5] die Benennung ‚Untersuchung‘ sowohl für die Bestimmung von **Nominalmerkmalen** als auch für **Messungen**. In ISO/IEC 17025 beinhaltet das Prüfverfahren, wo relevant, auch Aspekte der ‚Probenahme, Handhabung, Transport, Lagerung und Vorbereitung von zu prüfenden und/oder zu kalibrierenden Gegenständen‘. In ISO 15189 jedoch beinhaltet Untersuchung nicht die Probenahme. Letztere ist Teil der ‚Präanalytischen Maßnahmen‘ in Abschnitt 5.4 dieser Norm.

Ein **Messverfahren** enthält eine Beschreibung, wie ein **Messergebnis** gewonnen und angegeben wird, einschließlich der Berechnung. Ein **Messergebnis** wird im Allgemeinen als einzelner **Messwert** mit einer **Messunsicherheit** ausgedrückt. Das **Messverfahren** sollte daher die Schätzung der **Messunsicherheit**, die bei der Angabe des **Messergebnisses** verwendet wird, oder Informationen darüber, wie diese berechnet werden kann, enthalten.

Es gibt zwei Arten von **Messverfahren**, die als zwei separate Begriffe enthalten sind; **Referenzmessverfahren** und **Primärmessverfahren**.

Although not defined in VIM 3, the term ‘measurement process’ is used in a number of international Standards. It is defined in ISO 9000 [8] as ‘a set of operations to determine the value of a quantity’. However, since the VIM defines **measurement** as a process, the ISO 9000 term ‘measurement process’ and the VIM term ‘**measurement**’ can usually be considered to be synonymous. It is the overall process of performing and evaluating **measurements** and, as such, the **measurement principle**, **method** and **procedure** form part of the measurement process.

The most complete level of description of a **measurement** is the **measurement procedure** which should be sufficiently detailed to allow a suitably trained person to perform the **measurement**. In some laboratories the **measurement procedure** may be documented in one or more standard operating procedures (SOP). Although ISO/IEC 17025 [Fehler! Textmarke nicht definiert.] refers to **measurement procedures** in some clauses, ‘method’ and ‘test method’, are used and considered synonymous with **measurement procedure** as defined in VIM 3. However, it should be noted that the requirements of the Standard apply to both **measurements** and examinations. As mentioned earlier, ISO 15189 [5] uses the term ‘examination’ to refer both to the determination of **nominal properties** and **measurements**. In ISO/IEC 17025 the method includes, where relevant, aspects of ‘sampling, handling, transport, storage and preparation of items to be tested and/or calibrated’. However, in ISO 15189, examination does not include sampling; the latter is part of the ‘pre-examination’ covered in clause 5.4 of that Standard.

A **measurement procedure** includes a description of how **measurement results** are obtained and reported, including any calculation. A **measurement result** is generally expressed as a single **measured quantity value** and a **measurement uncertainty**. The **measurement procedure** should therefore include an estimate of the **measurement uncertainty** to be used when reporting **measurement results** or information on how it should be calculated.

There are two types of **measurement procedure** that are included as two separate concepts; they are **reference measurement procedures** and **primary reference measurement procedures**.

1.13 Referenzmessverfahren

anerkanntes **Messverfahren**, das **Messergebnisse** liefert, die für die beabsichtigte Anwendung geeignet sind, die **Richtigkeit** der **Messwerte** zu bewerten, die man mit anderen Messverfahren für **Größen** der gleichen **Art** durch **Kalibrierung** oder durch Charakterisierung von **Referenzmaterialien** erhalten hat. (VIM 2.7)

Referenzmessverfahren sind gut charakterisiert und liefern üblicherweise Messergebnisse mit einer kleinen **Messunsicherheit**. Zum Beispiel müssen im klinischen Sektor die Hersteller zur Erfüllung der Anforderungen der *In vitro* Diagnostik Richtlinie [19], **Referenzmessverfahren** oder **ZRM** (VIM 5.14) verwenden, um die **metrologische Rückführbarkeit** der Werte sicher zu stellen, die **Kalibriernormalen** zugewiesen werden. Das Joint Committee for Traceability in Laboratory Medicine (JCTLM) hat eine Liste mit einer Anzahl an **Referenzmessverfahren** publiziert [20], z.B. das NIST LC-MS-Referenzverfahren zur Bestimmung der Massenkonzentration von Cortisol in Blutserum [21].

In der Hierarchie der metrologischen Ordnung nimmt ein **Primärmessverfahren** die höchste Stufe ein.

1.14 Primärmessverfahren

Referenzmessverfahren, das verwendet wird, um ein **Messergebnis** zu erhalten, ohne dass ein Bezug zu einem **Normal** für eine **Größe** gleicher **Art** besteht (VIM 2.8)

Primärmessverfahren (oder einfach Primärverfahren) erlauben die Bestimmung eines **Größenwerts** mit direktem Bezug zur Definition der **Maßeinheit** oder zu Fundamentalkonstanten. Weil es keine Zwischenschritte gibt, liefern sie, unter den angegebenen Bedingungen, **metrologisch rückführbare Messergebnisse** mit dem höchsten Grad an **Genauigkeit**. Die Bestimmung der Stoffmenge durch Coulometrie, Gravimetrie oder Isotopenverdünnungs-Massenspektrometrie sind Beispiele für **Messmethoden**, die das Potential haben, die Basis für ein **Primärmessverfahren** zu bilden.

1.13 Reference measurement procedure

measurement procedure accepted as providing **measurement results** fit for their intended use in assessing **measurement trueness** of **measured quantity values** obtained from other measurement procedures for **quantities** of the same **kind**, in **calibration**, or in characterizing **reference materials** (VIM 2.7)

Reference measurement procedures are well characterised and will normally provide measurement results with a small **measurement uncertainty**. For example, in the clinical sector, to comply with the requirements of the *In vitro* Diagnostics Directive [19] manufacturers are required to use **reference measurement procedures** or **CRMs** (VIM 5.14) to establish the **metrological traceability** of values assigned to **calibrators**. The Joint Committee for Traceability in Laboratory Medicine (JCTLM) lists a number of **reference measurement procedures** [20], e.g. NIST LC-MS reference method for the determination of the mass concentration of cortisol in blood serum [21].

In the hierarchy of metrological order, the highest level is occupied by a **primary reference measurement procedure**.

1.14 Primary reference measurement procedure

reference measurement procedure used to obtain a **measurement result** without relation to a **measurement standard** for a **quantity** of the same **kind** (VIM 2.8)

Primary reference measurement procedures (also known as primary methods of measurement or, more simply 'primary methods') allow a **quantity value** to be determined with direct reference to the definition of its **measurement unit** or to fundamental constants. Because there are no other intermediate steps, they provide, under the stated conditions, **metrologically traceable measurement results** with the highest levels of **accuracy**. The determination of the amount of substance concentration by coulometry, gravimetry or by isotope dilution mass spectrometry are examples of **measurement methods** which have the potential to form the basis of **primary measurement procedures**.

1.15 Messergebnis

Menge von **Größenwerten**, die einer **Messgröße** zugewiesen sind, zusammen mit jeglicher verfügbarer, relevanter Information (VIM 2.9)

Das **Messergebnis** ist das Resultat jeglicher Messaktivitäten und das, was dem Kunden berichtet wird, sei es eine regelsetzende Behörde, die Akkreditierungsstelle oder ein kommerzieller Kunde.

In der Vergangenheit wurde 'Messergebnis' für verschiedene Dinge verwendet. Ein **Messgerät** liefert eine Zahl, d.h. eine **Anzeige**; diese Zahl kann mit Hilfe einer **Kalibrierkurve** (VIM 4.31) in ein unkorrigiertes Ergebnis umgewandelt werden. In einigen Fällen wird dieser Wert wegen des **Bias der Messung** (VIM 2.18) korrigiert und das korrigierte Ergebnis dem Kunden berichtet, zusammen mit z.B. einem Wiederfindungsfaktor und seiner **Messunsicherheit**. Das ist es, was nach der VIM 3 Definition ein **Messergebnis** ausmacht.

Dem Kunden wurde früher häufig nur eine einzelne Zahl als Ergebnis angegeben. Die VIM 3 Definition hat das Ziel, den Mangel an Konsistenz zu beseitigen, in dem das **Messergebnis** klar als das letztendliche Resultat des Prozesses der Bestimmung eines oder mehrerer **Größenwerte** einer **Messgröße** identifiziert wird, d.h. die Antwort liefert auf die Frage des Kunden. Jede Information über die **Messung**, die für den Kunden relevant ist, ist auch Teil des **Messergebnisses**.

Im Allgemeinen wird ein **Messergebnis** als einzelner **Messwert** und eine **Messunsicherheit** ausgedrückt. Das kann als 'Satz von **Größenwerten**' interpretiert werden, womit gemeint ist, dass jeder Wert innerhalb des durch die **Messunsicherheit** definierten Intervalls ein möglicher Wert für die **Messgröße** ist. Diese liefert dem Kunden Information über die Zuverlässigkeit des **Messergebnisses**, die berücksichtigt werden sollte, wenn es z.B. mit einem festgesetzten Grenzwert verglichen wird.

Die **Messunsicherheit** und ihr zugehöriges Vertrauensniveau sind Teil des **Messergebnisses**. Die **Messunsicherheit** wird nicht immer explizit angegeben, wenn sie für die Interpretation des Ergebnisses vernachlässigbar erscheint, wenn sie für die Interpretation nicht relevant ist, oder wenn sie vom Kunden nicht verlangt wird. Beispiele dafür, wo dies normalerweise zutrifft, sind a) das von einer Tankstellenzapfsäule geförderte Volumen, b) die Masse von Lebensmitteln, die auf einer modernen Waage in einem Supermarkt gewogen werden, und c) die Untersuchungsergebnisse, die ein Krankenhauslabor dem Arzt liefert. Dennoch wird die Unsicherheit berücksichtigt, da die Pumpe, die Waage und die klinischen Tests bestimmte Leistungskriterien erfüllen müssen, bevor sie in Betrieb genommen werden können.

ISO/IEC 17025 [4] verlangt, dass Informationen über die **Messunsicherheit** dann in Prüfberichten angegeben werden müssen, wenn sie für die Gültigkeit oder Anwendung des Prüfergebnisses relevant ist, auf Anweisung des Kunden, oder wenn die **Unsicherheit** die Konformität mit einer Spezifikation beeinträchtigt.

1.15 Measurement result

set of **quantity values** being attributed to a **measurand** together with any other available relevant information (VIM 2.9)

The **measurement result** is the outcome of any **measurement** activity and is what is reported to the customer, be it a regulatory body, the accreditation body or a commercial customer.

In the past, the term '**measurement result**' has been used to mean different things. A **measuring instrument** gives a number, i.e. an **indication**; the number can be converted into an uncorrected result using a **calibration curve** (VIM 4.31). In some cases, due to **measurement bias** (VIM 2.18), this value is corrected and the corrected result reported to the customer along with, e.g. a recovery factor with its **measurement uncertainty**. This is what constitutes a **measurement result** in the VIM 3 definition.

Historically, a single number was often all that was given to the customer. The VIM 3 definition aims to eliminate this lack of consistency, by clearly identifying a **measurement result** as the final outcome of the process of determining the **quantity value(s)** of a **measurand**, i.e. providing an answer to the customer's request. In this context, All the information about the **measurement** that is relevant to the customer is also part of the **measurement result**.

A **measurement result** is generally expressed as a single **measured quantity value** and a **measurement uncertainty**. This can be interpreted as a 'set of **quantity values**', meaning that any value, within the interval defined by the **measurement uncertainty** is a possible value for the **measurand**. This provides the customer with information on the reliability of the **measurement result**, which should be taken into account if, for example, it is compared with a stated limit.

The **measurement uncertainty** and the level of confidence associated with it are part of a **measurement result**. The **measurement uncertainty** may not always be explicitly reported if it is considered to be negligible in terms of interpreting the result, or if it is not relevant in the interpretation, or not required by the customer. Examples of where this normally holds true are a) the volume delivered by a petrol station pump, b) the mass of groceries weighed on a modern balance in a supermarket, and c) the examination results delivered to the physician by a hospital laboratory. However, the **uncertainty** is still taken into account, since the pump, the balance and the clinical tests must fulfil certain stated performance criteria before they can be put into use.

The requirements of ISO/IEC 17025 [4] are that information on **measurement uncertainty** shall be presented in test reports when it is relevant to the validity or application of the test results, when the customer's instruction so requires or when the **uncertainty** affects conformity to a specification.

1.16 Messwert

Größenwert, der ein **Messergebnis** repräsentiert (VIM 2.10)

Messwerte sind essenzieller Bestandteil eines **Messergebnisses**. Im einfachsten Fall, z.B. beim Wiegen von Brot oder Kartoffeln auf einer kommerziellen Waage, *ist* der **Messwert** das **Messergebnis**, da die **Messung** ein einfaches Ein-Schritt-Verfahren ist und keine Zwischenmessungen oder Berechnungen benötigt werden. In der analytischen Wissenschaft beinhaltet eine **Messung** jedoch viel häufiger eine Kombination mehrerer **Größenwerte**, entsprechend dem **Modell der Messung** (VIM 2.48). Der Endwert wird oft aus einem Mittelwert von Datensätzen aus wiederholten Messungen berechnet, der eine kleinere **Messunsicherheit** als die Einzelwerte haben wird. In vielen Fällen erfordert die Messgröße mehr als einen **gemessenen Größenwert**, erhalten mit separaten **Messverfahren**. Soll beispielsweise die Messgröße als Massenanteil eines Analyten auf der Basis der Trockenmasse definiert werden, werden sowohl der Feuchtigkeitsgehalt der Probe als auch der Massenanteil des Analyten benötigt.

1.17 Messabweichung

Messwert minus einem **Referenzwert** (VIM 2.16)

Keine **Messung** ist perfekt; die Tätigkeit des Messens selbst verursacht Änderungen in dem System, das gemessen wird. Es ist bequem, dieses Szenario als **Messabweichung** zu beschreiben, die jede individuelle **Messung** beeinflusst. Im Prinzip wird die **Messabweichung** als Differenz zwischen dem **Messwert** und einem **Referenzwert** beschrieben. In der Praxis ist es nicht möglich, die **Messabweichung** für eine **Messung** an einer Probe zu kennen, weil in diesem Falle der **Referenzwert** der unbekannte **wahre Wert der Größe** (VIM 2.11) ist. Die **Messabweichung** besteht aus zwei Komponenten, einer **systematischen Messabweichung** (VIM 2.17) und einer **zufälligen Messabweichung** (VIM 2.19), die einerseits die konstante oder vorhersagbare Variation und andererseits die nicht vorhersagbare Variation in einer Serie wiederholter **Messungen** beschreibt. Bekannte Parameter, die die Leistungsfähigkeit von Analysemethoden beschreiben, sind mit Schätzungen der zufälligen und systematischen Komponenten der **Messabweichung** verbunden (siehe Kapitel 4).

1.16 Measured quantity value

quantity value representing a **measurement result** (VIM 2.10)

Measured quantity values are an essential part of a **measurement result**. In the simplest cases, e.g. when weighing bread or potatoes on a commercial weighing scale, the **measured quantity value** *is* the **measurement result** as the **measurement** is a simple single step process and no intermediate **measurements** or calculations are required. However, more often, in analytical sciences, a **measurement** involves the combination of several **quantity values** according to the **measurement model** (VIM 2.48). The final value is often calculated as the average of the set of values obtained from repeated measurements, which will have a lower **measurement uncertainty** than the individual values. In many cases, the **measurand** requires more than one **measured quantity value** obtained with separate **measurement procedures**. For example if the **measurand** is to be defined as the mass fraction of an analyte on a dry weight basis, the moisture content of the sample and the mass fraction of the analyte are both required.

1.17 Measurement error

measured quantity value minus a **reference quantity value** (VIM 2.16)

No **measurement** is perfect; the very action of measuring introduces changes in the system subjected to **measurement**. It is convenient to describe this scenario in terms of a **measurement error**, affecting each individual **measurement**. In principle, the **measurement error** is represented by the difference between the **measured quantity value** and a **reference quantity value**. In practice, for a **measurement** on a test sample, the **measurement error** is unknowable. This is because, in this case, the **reference quantity value** is the unknown **true quantity value** (VIM 2.11) for the **measurand**. The **measurement error** consists of two components, **systematic measurement error** (VIM 2.17) and **random measurement error** (VIM 2.19), which represent respectively, the constant or predictable variation and the unpredictable variation in a series of replicate **measurements**. Well known parameters describing the performance of analytical methods are associated with the estimate of the random and systematic components of **measurement error** (see chapter 4).

1.18 Anzeige

von einem **Messgerät** oder **Messsystem** gelieferter **Größenwert** (VIM 4.1)

Die meisten **Messungen** basieren auf **Anzeigen**, die von **Messgeräten** oder **Messsystemen** geliefert werden. Eine **Anzeige** (z.B. das Signal oder die Antwort eines Gerätes) und der dazugehörige Wert der gemessenen **Größe** sind nicht notwendigerweise Werte von **Größen** derselben **Art** (VIM 1.2). In vielen Fällen ist die **Anzeige**, die von einem **Messgerät** oder einem **Messsystem** geliefert wird, ein Wert einer **Größe**, die von der **Messgröße** verschieden ist. In den meisten Fällen sind Analytiker auf die **Messung** physikalischer **Größen** wie der Masse eines Fällungsproduktes, des Volumens einer Titrierlösung oder Änderung eines elektrischen Signals durch die Absorption von Strahlung bei einer bestimmten Wellenlänge angewiesen. Diese **Anzeigen** werden dann auf Grund bekannter stöchiometrischer Verhältnisse oder mit Hilfe einer **Kalibrierkurve** (VIM 4.31) in **Größen** umgerechnet, die in einer Beziehung zur Stoffmenge stehen. In der chemischen Analytik ist es üblich, das Gerätesignal zunächst für eine Reihe von Bezugslösungen und dann für die Probe zu beobachten. In diesem Zusammenhang wird üblicherweise ‚Gerätesignal‘ für die **Anzeige** verwendet. In ähnlicher Weise bezieht sich die **Hintergrundanzeige** (VIM 4.2) auf das Gerätesignal für ein Probenmaterial, von dem man glaubt, dass der gewünschte Analyt nicht enthalten ist (in VIM 3 wird der Ausdruck verwendet: „Es wird angenommen, dass die Größe nicht vorhanden ist“).

1.19 Messgerät

Gerät, das allein oder in Verbindung mit zusätzlichen Einrichtungen für die Durchführung von **Messungen** verwendet wird (VIM 3.1)

Messgerät steht in engem Zusammenhang mit dem Begriff ‚**Messsystem**‘.

1.20 Messsystem

Kombination aus **Messgeräten** und oft anderen Geräten sowie bei Bedarf Reagenzien und Versorgungseinrichtungen, die so angeordnet und angepasst sind, dass sie Information liefern, um **Messwerte** innerhalb bestimmter Intervalle für **Größen** bestimmter **Arten** zu erhalten (VIM 3.2)

In einigen Fällen, wenn das **Messgerät** allein verwendet werden kann (z.B. ein Quecksilber-Glasthermometer) besteht das **Messsystem** aus einem **Messgerät**. Für die Mehrheit der analytischen Methoden besteht das Messsystem jedoch aus mehreren Messgeräten mit Zubehör und Reagenzien.

1.18 Indication

quantity value provided by a **measuring instrument** or a **measuring system** (VIM 4.1)

Most **measurements** are based on **indications** provided by **measuring instruments** or **measuring systems**. An **indication** (e.g. an instrument signal or response) and a corresponding value of the **quantity** being measured are not necessarily values of **quantities** of the same **kind** (VIM 1.2). In many cases, the **indication** provided by the **measuring instrument** or **measuring system** will be a value related to a **quantity** different from the **measurand**. In most cases in analytical science, analysts rely on the **measurement** of physical **quantities** such as mass of precipitate, volume of titrant, or the change in electrical signal produced by the absorption of radiation of a particular wavelength. These **indications** are then converted, using well known stoichiometric relationships or a **calibration curve** (VIM 4.31), to **quantities** related to the amount of substance. In chemical analysis it is quite common to observe an instrument response for a series of reference solutions and then for the test sample, so in this context the term ‘instrument response’ is generally used for **indication**. Similarly **blank indication** (VIM 4.2) refers to the instrument response for a test material where the analyte of interest is believed to be absent (in VIM 3 the phrase ‘supposed not to be present’ is used).

1.19 Measuring instrument

device used for making **measurements**, alone or in conjunction with one or more supplementary devices (VIM 3.1)

Measuring instrument is closely related to the concept ‘**measuring system**‘.

1.20 Measuring system

set of one or more **measuring instruments** and often other devices, including any reagent and supply, assembled and adapted to give information used to generate **measured quantity values** within specified intervals for **quantities** of specified **kinds** (VIM 3.2)

In some cases, when the **measuring instrument** can be used alone (e.g. mercury-in-glass thermometer) the **measuring system** consists of one **measuring instrument**. However, for the majority of analytical methods the **measuring system** consists of several **measuring instruments** and associated equipment and reagents.

VIM 3 definiert drei Typen von **Messgeräten**.

- **Anzeigende Messgeräte** (VIM 3.3) liefern direkt ein Ausgabesignal, beispielsweise eine Zahl (z.B. eine elektronische Waage) oder ein visuelles/akustisches Signal. Diese Ausgabe kann zu einem anderen Gerät übertragen werden, z.B. einem Computer mit Software zur Datenintegration.
- **Visuell anzeigende Messgeräte** (VIM 3.4), ein bestimmter Typ eines anzeigenden Messgeräts, zeigen das **Messergebnis** auf einer Skala an, z.B. ein Quecksilber-Glaskthermometer oder eine Federwaage. Bei Geräten mit analoger Ausgabe erfolgt die **Anzeige** durch die Position eines Zeigers.
- **Maßverkörperungen** (VIM 3.6) sind dazu gedacht, einen zugewiesenen **Größenwert** zu reproduzieren, z.B. Messkolben, Standardgewichte oder **ZRM** (VIM 5.14).

Die Unterscheidung zwischen diesen Kategorien von Messinstrumenten ist bei analytischen Messungen normalerweise nicht von Belang.

1.21 Metrologische Vergleichbarkeit von Messergebnissen

Vergleichbarkeit von **Messergebnissen**, für **Größen** einer **Art**, die metrologisch auf dieselbe Referenz rückführbar sind (VIM 2.46)

VIM 3 verwendet das Wort Vergleichbarkeit im Sinne von 'Eignung für einen Vergleich', **nicht** im Sinne von 'von gleicher Quantität' sein. Daher müssen **Messgrößen** oder **Messunsicherheiten** nicht von gleicher Größenordnung sein, um vergleichbar zu sein. So sind beispielsweise Messergebnisse zur Bestimmung des Massenanteils von Chrom in einer Legierung und in einer Probe kontaminierten Bodens metrologisch vergleichbar, wenn sie auf dieselbe Maßeinheit rückführbar sind.

Der Zweck von **Messungen** besteht oft darin, einen Vergleich zwischen einem erzielten **Messergebnis** und einem anderen Wert für eine **Größe** derselben **Art** zu ermöglichen (VIM 1.2), z.B. einem gesetzlichen Grenzwert oder einem Referenzintervall. Beispiele für mögliche Fragen, die ein Kunde stellen könnte, sind: 'Ist der Massenanteil an Blei in dieser Bodenprobe größer als der erlaubte Grenzwert?' oder 'Ist der Massenanteil von Blei in zwei Bodenproben signifikant verschieden?' Eine Frage, die sich zum Beispiel im gesetzlich geregelten Bereich häufig stellt, ist: 'Sind die Ergebnisse zweier Laboratorien voneinander verschieden?' Um diese Frage beantworten zu können, müssen die **Messergebnisse** metrologisch vergleichbar sein.

Ein Vergleich ist nur dann aussagekräftig, wenn die Ergebnisse auf dieselbe (bevorzugt international anerkannte) Referenz rückführbar sind. Dies könnte z.B. das Meter oder der **Größenwert** eines **ZRM** (VIM 5.14) sein.

VIM 3 defines three types of **measuring instruments**.

- **Indicating measuring instruments** (VIM 3.3) provide an output signal directly, for example a number (e.g. an electronic balance) or a visual/acoustic signal. The output may be transferred to another device, e.g. a computer with software providing data integration.
- **Displaying measuring instruments** (VIM 3.4), a particular type of indicating instrument, display the **result of a measurement** on a scale, e.g. mercury-in-glass thermometer, a spring balance. For instruments with analogue outputs, the **indication** is given by the position of a pointer on the display.
- **Material measures** (VIM 3.6) are intended to reproduce an assigned **quantity value**, e.g. volumetric flasks, standard weights or **CRMs** (VIM 5.14).

Distinguishing between these categories of **measuring instruments** is not normally a concern in analytical measurement.

1.21 Metrological comparability of measurement results

comparability of **measurement results**, for **quantities** of a given **kind**, that are metrologically traceable to the same reference (VIM 2.46)

VIM 3 uses the word comparability in the sense of 'ability to compare' **not** in the sense of being 'similar in magnitude'. Hence, to be comparable the **measured quantity values** or the **measurement uncertainties** do not have to be of the same order of magnitude. For example, measurement results for the determination of the mass fraction of chromium in an alloy and in a sample of contaminated soil are **metrologically comparable** when they are traceable to the same **measurement unit**.

The purpose of making **measurements** is often to enable a comparison to be made between the **measurement result** obtained and another value for a **quantity** of the same **kind** (VIM 1.2), e.g. a legal limit or a reference interval. Examples of possible questions asked by a customer are, 'Is the mass fraction of lead in this sample of soil greater than the allowed limit?' or 'Is the mass fraction of lead in two samples of soil significantly different?' A question which often arises, for instance, in a legal context is, 'Are the results provided by the two laboratories different?' In order to be able to answer these questions, **measurement results** need to be metrologically comparable.

A comparison is only meaningful if the results are traceable to the same reference (preferably internationally accepted) which may be, e.g. the metre or the **quantity value** of a **CRM** (VIM 5.14).

Der Begriff Vergleichbarkeit ist eng verknüpft mit dem Begriff Verträglichkeit.

1.22 Metrologische Verträglichkeit von Messergebnissen

Eigenschaft einer Menge von **Messergebnissen** für eine **Messgröße** in der Weise, dass der Absolutwert der Differenz eines beliebigen Paares der **Messwerte** aus zwei unterschiedlichen Messergebnissen kleiner ist als ein gewähltes Vielfaches der **Standardmessunsicherheit** dieser Differenz (VIM 2.47)

Wenn ein Satz von zwei Ergebnissen **metrologisch verträglich** sein soll, sollte die Differenz zwischen ihnen kleiner sein als die **erweiterte Unsicherheit** (VIM 2.35) ihrer Differenz. Durch Kenntnis des Werts der **Messunsicherheit** des **Größenwerts** ist es möglich, die zulässige Differenz (d) zwischen einem Paar unabhängiger Ergebnisse, die sich auf dieselbe **Messgröße** beziehen, zu berechnen.

Eine Differenz zwischen x_1 und x_2 , die größer als d ist, suggeriert ein mögliches Versagen des **Messsystems**, einen Wechsel der **Messgröße** oder, dass die **Messunsicherheit** eines oder beider Ergebnisse unkorrekt abgeschätzt wurde.

Die **Standardunsicherheit** (VIM 2.30) $u(d)$ der Differenz zwischen zwei vollständig unabhängigen **Messergebnissen** x_1 und x_2 (z.B. erhalten von zwei verschiedenen Laboratorien) ist gegeben durch die Gleichung:

$$u(d) = \sqrt{u(x_1)^2 + u(x_2)^2}$$

wobei $u(x_1)$ und $u(x_2)$ die **Standardunsicherheiten** zu x_1 und x_2 sind. Damit zwei **Messergebnisse** als **metrologisch verträglich** betrachtet werden können, muss deshalb die Differenz d kleiner sein als $ku(d)$, wobei k der **Erweiterungsfaktor** (VIM 2.38) ist, der für das benötigte Vertrauensniveau angemessen ist.

Für einen größeren Satz von Ergebnissen kann die **metrologische Verträglichkeit** nicht so einfach bestimmt werden. Das ‚gewählte Vielfache‘ in der Definition hängt von dem benötigten Grad des Vertrauens und der Anzahl beteiligter gepaarter Vergleiche ab.

Die Korrelation zwischen **Messungen** beeinflusst die **metrologische Verträglichkeit** von **Messergebnissen**. Die **Standardunsicherheit** der Differenz ist kleiner für eine positive Korrelation und größer für eine negative Korrelation.

The concept comparability is associated with the concept compatibility.

1.22 Metrological compatibility of measurement results

property of a set of **measurement results** for a specified **measurand**, such that the absolute value of the difference of any pair of **measured quantity values** from two different measurement results is smaller than some chosen multiple of the **standard measurement uncertainty** of that difference (VIM 2.47)

For a set of two results to be **metrologically compatible** the difference between them should be smaller than the **expanded uncertainty** (VIM 2.35) of their difference. With knowledge of the value of the **measurement uncertainty** of the **quantity values** it is possible to calculate a permissible difference (d) between a pair of independent results which refer to the same **measurand**.

A difference between x_1 and x_2 greater than d suggests a possible failure of the **measuring system**, a change in the **measurand** or that the **measurement uncertainty** of one or both results has been estimated incorrectly.

The **standard uncertainty** (VIM 2.30) of the difference $u(d)$ between two completely independent **measurement results** x_1 and x_2 (obtained, for example, from two different laboratories) is given by the equation:

$$u(d) = \sqrt{u(x_1)^2 + u(x_2)^2}$$

where $u(x_1)$ and $u(x_2)$ are the **standard uncertainties** associated with x_1 and x_2 respectively. Therefore, for two **measurement results** to be considered **metrologically compatible**, the difference d must be less than $ku(d)$, where k is the **coverage factor** (VIM 2.38) appropriate for the required level of confidence.

For a larger set of results **metrological compatibility** cannot be determined so easily. The ‘chosen multiple’ in the definition would depend on the level of confidence required and the number of paired comparisons involved.

Correlation between the **measurements** influences **metrological compatibility** of **measurement results**. The **standard uncertainty** of the difference will be lower for positive correlation and higher for negative correlation.

2.0. Metrologische Rückführbarkeit

Dieses Kapitel beschreibt die Terminologie zur metrologischen Rückführbarkeit. Weitere Informationen, wie die Rückführbarkeit von Messergebnissen erreicht werden kann, sind in einem Eurachem/CITAC-Guide [22] und in einem IUPAC Technical Report [23] zu finden.

2.1 Metrologische Rückführbarkeit

Eigenschaft eines **Messergebnisses**, wobei das Ergebnis durch eine dokumentierte, ununterbrochene Kette von **Kalibrierungen**, von denen jede zur **Messunsicherheit** beiträgt, auf eine Referenz bezogen werden kann. (VIM 2.41)

Die meisten chemischen Analysen beinhalten den Vergleich eines Laborergebnisses mit Werten, die zu einer anderen Zeit an anderen Orten erhalten wurden, z.B. dem Wert auf einem Zertifikat, einem gesetzlichen Grenzwert oder einem Ergebnis, das mit einem anderen **Messverfahren** erhalten wurde.

Die **metrologische Rückführbarkeit** ist für aussagekräftige **Messergebnisse** essenziell, da sie zeigt, dass solche Vergleiche wissenschaftlich valide sind. Es ist aussagekräftig, die Länge eines Fußballfeldes mit der Distanz zwischen zwei Straßenlampen zu vergleichen, solange beide in Meter ausgedrückt werden – derselben **Maßeinheit**. Aber nur weil Ergebnisse **metrologisch rückführbar** sind, heißt das weder, dass sie für den Einsatzzweck geeignet sind, noch, dass die **Messunsicherheit** adäquat ist. Zum Beispiel ist das Messergebnis einer Wägung einer bestimmten Masse Natriumchlorid mit einer zweistelligen, kalibrierten Waage **metrologisch rückführbar** auf das Kilogramm. Das kann ausreichend sein für die Herstellung von Reagenzien wie Puffer, aber nicht ausreichend genau für die Herstellung von Kalibrierlösungen für die Bestimmung kleiner Natriumkonzentrationen in Wasser. Um sicher zu stellen, dass **Messergebnisse** für den Einsatzzweck geeignet sind, müssen zusätzlich die **Messverfahren** validiert (siehe Kapitel 4) und adäquate laufende Qualitätskontrollverfahren installiert sein.

2.1.1 Referenzpunkte

Nach VIM 3 gibt es drei Typen von Referenzen (siehe Anmerkung 1 zur Definition von **Metrologischer Rückführbarkeit**)

- Eine **Maßeinheit**, z.B. mol L⁻¹, g, mg kg⁻¹, °C, µkat L⁻¹, über ihre praktische Realisierung (s. Abschnitt 2.1.2)

2.0. Metrological traceability

This chapter describes the terminology relating to metrological traceability. Further information on how to establish the traceability of measurement results is given in a Eurachem/CITAC [22] und in einem IUPAC Technical Report [23].

2.1 Metrological traceability

property of a **measurement result** whereby the result can be related to a reference through a documented unbroken chain of **calibrations**, each contributing to the **measurement uncertainty** (VIM 2.41)

Most chemical analyses involve comparing a laboratory result with values produced at different times and locations, e.g. a value on a certificate, a legal limit, or a result obtained with a different **measurement procedure**.

Metrological traceability is essential for meaningful **measurement results** as it helps demonstrate that such comparisons are scientifically valid. It is meaningful to compare the length of a football field with the distance between street lights as long as they are both expressed in metres – the same **unit of measurement**. However, just because results are **metrologically traceable** does not mean they are fit for purpose as it does not ensure that the **measurement uncertainty** is adequate. For example, the **measurement result** obtained when weighing a certain mass of sodium chloride using a calibrated technical (2-figure) balance is **metrologically traceable** to the kilogram. This may be fit for purpose for preparing reagents such as buffers but may not be sufficiently accurate for the preparation of calibration solutions for the determination of low concentrations of sodium in water. In addition, to ensure that **measurement results** are fit for purpose, the **measurement procedures** used must be validated (see chapter 4) and adequate on-going quality control procedures must be in place.

2.1.1 Reference points

According to VIM 3 there are three types of reference (see Note 1 of the definition of **metrological traceability**).

- A **measurement unit**, e.g. mol L⁻¹, g, mg kg⁻¹, °C, µkat L⁻¹, through its practical realisation (see section 2.1.2).

- Werte, die mit einem **Referenzmessverfahren**, das vollständig definiert und international akzeptiert ist, erhalten wurden, z.B. die Messverfahren, die in den IFCC **Primärmessverfahren** für die **Messung** der katalytischen Aktivitätskonzentration von alkalischer Phosphatase in menschlichem Serum [24].
- Ein **Normal**, z.B. das **ZRM** (VIM 5.14) SRM[®] 2193a CaCO₃ pH standard, das, wenn es gemäß der Anleitung im Zertifikat hergestellt wird, einen zertifizierten pH-Wert von 12,645 bei 20° C mit einer **erweiterten Unsicherheit** (VIM 2.35) von 0,011 ($k = 2$) hat.
- Values obtained from a **reference measurement procedure**, which is fully defined and internationally agreed upon, e.g. the procedures defined in the IFCC **primary reference procedure** for the **measurement** of catalytic activity concentration of alkaline phosphatase in human serum [24].
- A **measurement standard**, e.g. the **CRM** (VIM 5.14) SRM[®] 2193a CaCO₃ pH standard which, when prepared according to the instructions given in the certificate, has a certified pH value of 12.645 at 20 °C with an **expanded uncertainty** (VIM 2.35) of 0.011 ($k = 2$).

Alle drei Strategien liefern **Referenzwerte** mit entsprechenden **Maßeinheiten**. Kalibrierung anhand dieser Referenzwerte ermöglicht es dem Analytiker, Ergebnisse in denselben oder abgeleiteten **Einheiten** zu liefern.

Die ‚ununterbrochene Kette von Kalibrierungen‘ ist eine **messtechnische Rückführungskette** (VIM 2.42), bestehend aus der Abfolge von **Messnormalen** und **Kalibrierungen**, die verwendet werden, um ein Messergebnis mit einer Referenz in Beziehung zu setzen. Ein allgemeines Fließdiagramm der metrologischen **Rückführbarkeit** zeigt Abbildung 1. Die Richtung zunehmender **Messunsicherheit** und die **Kalibrierhierarchie** (VIM 2.40) werden dargestellt. Die **Kalibrierhierarchie** ist eine Folge von **Kalibrierungen** von der gewählten Referenz bis zum endgültigen **Messsystem**, wobei das Resultat jeder **Kalibrierung** vom Resultat der vorhergehenden **Kalibrierung** abhängt. Die **messtechnische Rückführungskette** ist durch die gewählte **Kalibrierhierarchie** definiert.

ISO/IEC 17025 [4] und viele andere Normen fordern, dass Ergebnisse auf einen angemessenen Referenzpunkt rückführbar sind, und akkreditierte Laboratorien müssen in der Lage sein, dies zu zeigen. Laboratorien können ihre eigene **messtechnische Rückführungskette** ermitteln, indem sie die Dokumentation ihrer Routineverfahren, Geräte und **Kalibriernormale** durchsehen. Beispiele für allgemeine **messtechnische Rückführungsketten** finden sich in der Norm ISO 17511 [25]. Der IUPAC Technical Report zum Nachweis der Rückführbarkeit in der Chemie enthält die folgenden sieben erläuterten Beispiele für **messtechnische Rückführungsketten** [23].

- Stoffmengenkonzentration einer Säure in einer Lösung,
- pH-Wert einer Lösung,
- Massenkonzentration von Ethanol in der Atemluft,
- Zahlenverhältnis von Isotopen eines Elements in einem Material,
- Massenanteil von Glyphosat in einer Agrarchemikalie,
- Amount of substance concentration of an acid in a solution;
- pH of a solution;
- mass concentration of ethanol in breath;
- number ratio of isotopes of an element in a material;
- mass fraction of glyphosate in an agricultural chemical;
- amount of substance concentration of creatininium in blood plasma;
- mass fraction of protein in grain.

All three strategies provide **reference values** with appropriate **measurement units**. Calibration using these reference values allows the analyst to provide results in the same, or derived, **units**.

The ‘unbroken chain of calibrations’ is a **traceability chain** (VIM 2.42), consisting of the sequence of **measurement standards** and **calibrations** used to relate a **measurement result** to a reference. A generic flow chart of **metrological traceability** is shown in Figure 1. The direction of increasing **measurement uncertainty** and the **calibration hierarchy** (VIM 2.40) are illustrated. The **calibration hierarchy** is a sequence of **calibrations** from the chosen reference to the final **measuring system** where the outcome of each **calibration** depends on the outcome of the previous **calibration**. The **traceability chain** is defined by the chosen **calibration hierarchy**.

ISO/IEC 17025:2017 [4] and many other Standards require that results be traceable to an appropriate reference point and accredited laboratories must be able to demonstrate this. The laboratory can draw its own **traceability chains** by studying the documentation for its routine procedures, equipment and **calibrators**. Examples of generic **traceability chains** can be found in the Standard ISO 17511 [25]. The IUPAC Technical report on establishing traceability in chemistry contains the following seven illustrated examples of **traceability chain** [23]:

- Stoffmengenkonzentration von Creatinin in Blutplasma,
- Massenanteil von Protein in Getreide.

2.1.2 Praktische Realisierung einer Maßeinheit

Im Falle der **metrologischen Rückführbarkeit auf eine Maßeinheit** (VIM 2.43) ist die Referenz die Definition der **Einheit** durch ihre praktische Realisierung. Was bedeutet das in der Praxis? Die Realisierung der Definition einer **Einheit** ist das Verfahren, mit dem die Definition benutzt werden kann, um den **Wert** einer **Größe** (VIM 1.2) derselben **Art** wie die **Einheit** und seine zugehörige **Messunsicherheit** festzulegen. Masse und Stoffmenge sind zwei **Basisgrößen** (VIM 1.4). Ihre korrespondierenden **Basiseinheiten** (VIM 1.10) sind das Kilogramm bzw. das Mol. Obwohl die Definition des Kilogramms geändert wurde und es keinen internationalen Kilogrammprototyp mehr gibt (siehe Abschnitt 1.8), wird die **Einheit** nach wie vor mit genau definierten Messverfahren, z. B. mit einer Kibble-Waage [9], bestimmt. Die **Maßeinheit**, oder Vielfache von ihr, werden durch kalibrierte Massestücke verkörpert. Die Verkörperung (Realisierung) wird erhalten durch die **Messung** mit einem **Primärmessverfahren** und einem **Messsystem** zur Zuweisung eines **Größenwerts** und einer **Messunsicherheit**.

Die überarbeitete Definition des Mols wird in Abschnitt 1.8 erörtert. Eine übliche Realisierung des Mols erfolgt durch Wägung. Die Stoffmenge n in einer reinen Probe wird durch die Bestimmung der Masse m der Probe und Dividieren durch die molare Masse M gemäß:

$$n = m / M$$

ermittelt. Dieser Ansatz ist nur dann möglich, wenn der chemische Bestandteil oder die Bestandteile, spezifiziert in der **Messgröße**, definiert werden können. Wenn das nicht der Fall ist, dann kann die Stoffmenge nicht gemessen werden. In diesen Fällen können andere **Größen**, wie die Masse, die keine zu spezifizierende Bestandteile benötigen, gewählt werden. Zur Angabe von **Messergebnissen** in der **SI** (VIM 1.16) Einheit Mol würde die Verkörperung der Definition des Mols **Primärnormale** (VIM 5.4) für jede der Millionen von chemischen Verbindungen erfordern. Um dieses Problem zu lösen, hat das Consultative Committee for Amount of Substance (CCQM) **Messprinzipien** (VIM 2.4) und **Messmethoden** (VIM 2.5) ausgewählt, die das Potential haben, **Größenwerte** in Mol oder seinen **abgeleiteten Einheiten** (VIM 1.11) für solche **Größen** zuzuweisen, die von Materialien getragen werden, die dann primäre Kalibriernormale werden, z.B. **ZRM** (VIM 5.14).

2.1.2 Practical realisation of a measurement unit

In the case of **metrological traceability to a measurement unit** (VIM 2.43), the reference is the definition of a **unit** through its practical realisation. What does this mean in practice? The realisation of the definition of a **unit** is the procedure by which the definition may be used to establish the **value**, and associated **measurement uncertainty**, of a **quantity** of the same **kind** (VIM 1.2) as the **unit**. Mass and amount of substance are two **base quantities** (VIM 1.4). They correspond to the **base units** (VIM 1.10) of the kilogram and the mole respectively. Although the definition of the kilogram has been changed and there is no longer an international prototype kilogram (see section 1.8) the realisation of the **unit** will still be made using well defined measurement procedures using, e.g. a Kibble balance [9]. The **measurement unit**, or multiples of it, are embodied in calibrated weights. The embodiment (realisation) is achieved by **measurement** using a **primary reference measurement procedure** and a **measuring system** to assign a **quantity value** and a **measurement uncertainty**.

The revised definition of the mole is discussed in section 1.8. A common realisation of the mole is achieved through weighing. The amount of substance n in a pure sample is measured by determining the mass m of the sample and dividing by the molar mass M according to:

$$n = m / M$$

This approach is only possible when the chemical entity or entities, specified in a **measurand**, can be defined. If this is not the case then amount of substance cannot be measured. In such cases, other **quantities**, such as mass, which do not need entities to be specified, can be chosen. To report **measurement results** in the **SI** (VIM 1.16) unit mole, the embodiment of the definition of the mole would require a **primary measurement standard** (VIM 5.4) for each of the millions of chemical compounds. To overcome this problem the Consultative Committee for Amount of Substance (CCQM) has selected **measurement principles** (VIM 2.4) and **measurement methods** (VIM 2.5) that have the potential to assign **quantity values** in mole, or its **derived units** (VIM 1.11), for the **quantities** carried by materials which then become primary calibrators, e.g. **CRMs** (VIM 5.14).

2.1.3 Weg zur Erreichung metrologischer Rückführbarkeit

Das Erreichen und der Nachweis der **metrologischen Rückführbarkeit** sind in der Chemie oft nicht einfach. Ein Grund dafür ist, dass es unter Umständen mehrere Wege geben kann, das **Messergebnis** für dieselbe **Messgröße** zu erhalten. Zum Beispiel kann die quantitative Analyse von Kupfer in einer Wasserprobe mit verschiedenen Typen spektrometrischer Geräte durchgeführt werden, mit oder ohne Aufschluss, Abtrennungs- oder Aufkonzentrierungsschritten. Zusätzlich bedeutet die Komplexität der zu prüfenden Materialien, dass oft eine umfangreiche Probenvorbereitung und Probenreinigungs-Schritte notwendig sind, was einfache Vergleiche zwischen **Normalen** und Proben schwierig macht. Die Terminologie im Zusammenhang mit **Messnormalen** wird in Abschnitt 2.4.1 ausführlicher erläutert.

Das in der Abbildung 1 gezeigte **Sekundärnormal** (VIM 5.5) dient innerhalb des gegebenen **Referenzmessverfahrens** zur **Kalibrierung** des Messsystems. Dieses **Referenzmessverfahren** ist dasjenige, das verwendet wird, um dem **Kalibriernormal**, z.B. einem **ZRM** (VIM 5.14), das im Labor bei der Analytik von Routineproben verwendet wird, einen Wert zuzuweisen. Die Wahl des **Kalibriernormals** hängt vom **Messverfahren** und vom Zweck, für den die Messung gemacht wird, ab. Analytiker müssen den Einfluss des gesamten Messprozesses inklusive der Probenahme auf die **messtechnische Rückführbarkeit** des **Messergebnisses** bewerten.

Kommerzielle Hersteller bieten normalerweise verschiedene Materialien für die Herstellung von **Gebrauchsnormalen** (VIM 5.7) für die **Kalibrierung** von **Routinemessungen** an. Es gibt z.B. Kupferstücke mit angegebener Reinheit und Lösungen mit spezifizierter Stoffmengenkonzentration und Matrixzusammensetzung. Die **Unsicherheit im Wert des Normals** beeinflusst direkt die **Messunsicherheit** des Endergebnisses. Deshalb haben Analytiker hier u.U. eine Auswahl.

Nur wenige Standards eignen sich zum **Sekundärnormal**, und die Zahl der **Primärnormale** (VIM 5.4) und Primärverfahren ist noch kleiner. Deshalb sind die **Messungen** von Kupfergehalten, die in verschiedenen Laboratorien gemacht werden, rückführbar auf eine festgesetzte Referenz über dasselbe primäre **Kalibriernormal** oder Verfahren, obwohl sich der untere Teil der Kette in Abb. 1 unterscheiden wird. Viele **Messungen** des Proteins Transferrin in Serum in medizinischen Laboratorien sind rückführbar auf die **SI** Einheit g L^{-1} über das **ZRM** ERM® DA 470k/IFCC [26].

Das Labor muss die **messtechnische Rückführbarkeit** der Schritte unterhalb der gestrichelten Linie in Abbildung 1 sicher stellen.

Messtechnische Rückführbarkeit ist die Eigenschaft eines Ergebnisses. Im allgemeinen Beispiel der Abb. 1 ist das **Messergebnis** der **Größenwert** und seine **Messunsicherheit**, zusammen mit jeder anderen relevanten Information für die Probe.

2.1.3 Route to achieving metrological traceability

Establishing and demonstrating **metrological traceability** in chemistry is often not straightforward. One reason is that there may be several ways of obtaining the **measurement result** for the same **measurand**. For example, the quantitative analysis of copper in a water sample can be carried out using various types of spectrometric instrumentation, with or without digestion, separation, and pre-concentration steps. In addition, the complexity of test materials means that extensive sample pre-treatment and clean-up is often required which makes straightforward comparisons between **measurement standards** and test samples difficult. The terminology associated with **measurement standards** is discussed in more detail in section 2.4.1.

The **secondary measurement standard** (VIM 5.5) shown in Figure 1 serves to **calibrate** the **measuring system**, within the given **reference measurement procedure**. This **reference measurement procedure** is the one used to assign a value to the **calibrator**, e.g. a **CRM** (VIM 5.14), used in the laboratory during the analysis of routine samples. The choice of **calibrator** will depend on the **measurement procedure** and the purpose for which the measurement is being made. Analysts must assess the influence of the entire measurement process, including sampling if appropriate, on the **metrological traceability** of the **measurement result**.

Manufacturers normally offer various materials for the preparation of **working measurement standards** (VIM 5.7) for **calibration** of routine **measurements**. There are, e.g. pieces of copper metal with stated purity, and solutions with specified amount-of-substance concentration and matrix composition. The **uncertainty** in the **value** of the **calibrator** will directly influence the **measurement uncertainty** of the final result so here the analyst may have a choice.

Fewer standards qualify as **secondary measurement standards**, and there are an even smaller number of **primary measurement standards** (VIM 5.4) and primary procedures available. So although the lower parts of the chain shown in Figure 1 will differ, **measurements** of the concentration of copper made in different laboratories will be traceable to a stated reference via the same primary **calibrator** or procedure. Many of the **measurements** of the protein transferrin in serum performed in medical laboratories are traceable to the **SI** unit g L^{-1} via the **CRM** ERM® DA 470k/IFCC [26].

The laboratory has to ensure the **metrological traceability** at the steps shown below the dotted line in Figure 1.

Metrological traceability is the property of a result. In the generic example in Figure 1 the **measurement result** is the **quantity value** and its **measurement uncertainty**, together with any other relevant information relating to the sample.

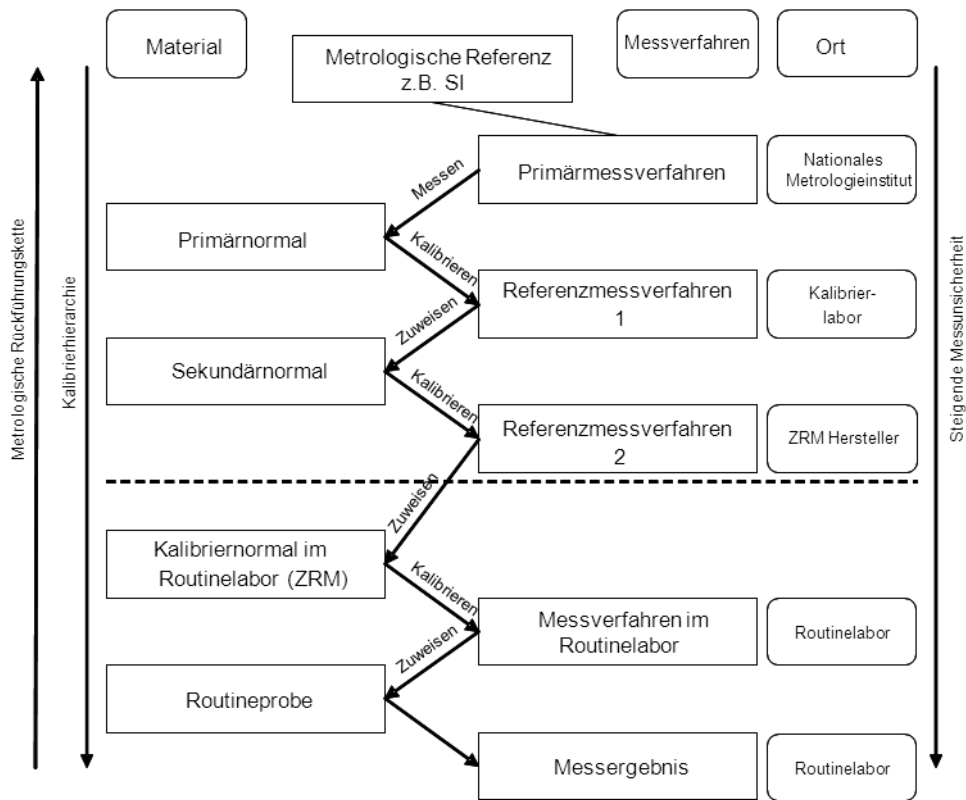


Abbildung 1 Beispiel für eine allgemeine Rückführungskette. Die Rückführungskette bezieht sich auf das Messergebnis für eine Routineprobe bis zum Referenzpunkt (hier das SI) über eine Sequenz von Kalibrierungen (die Pfeile). Unsicherheiten, die in allen Verfahren und Normalen enthalten sind, pflanzen sich fort bis zum Endergebnis. Die Pfeile links zeigen die Richtung der Rückführungskette (aufwärts) und die Richtung der Kalibrierhierarchie (abwärts). Der Pfeil rechts zeigt an, dass die Messunsicherheit von der metrologischen Referenz bis zum Messergebnis steigt.

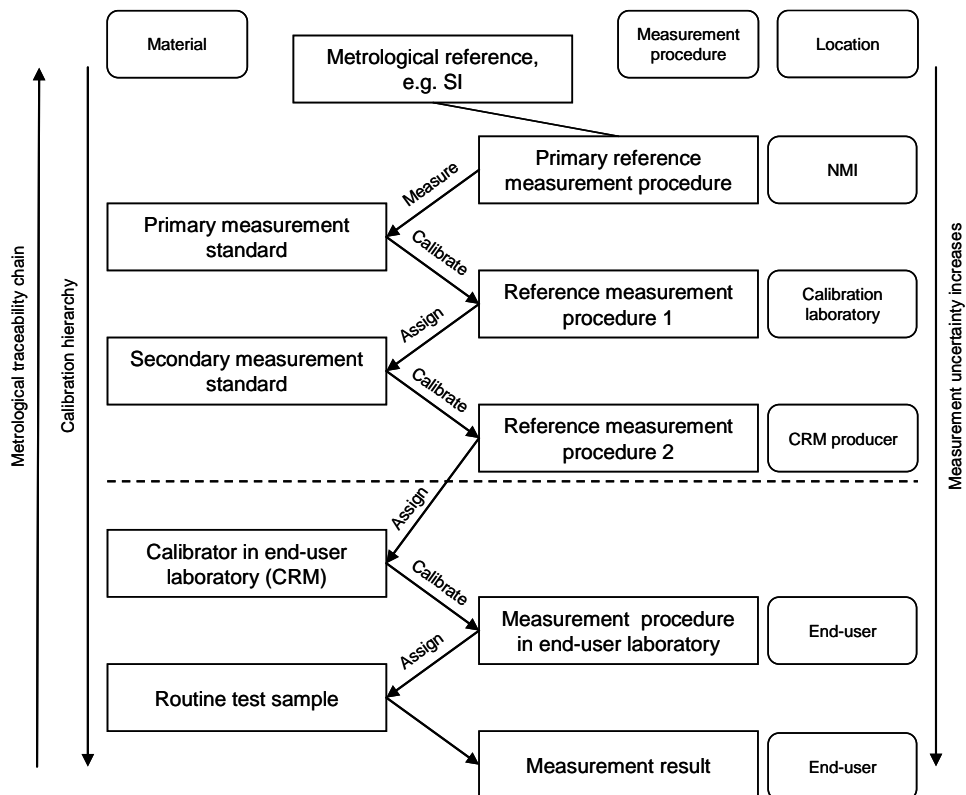


Figure 1 Example of a generic traceability chain. The traceability chain relates the measurement result for a routine test sample to the reference point (here the SI) via a sequence of calibrations (the arrows). Uncertainties, present in all procedures and calibrators, are propagated to the final result. The arrows to the left illustrate the direction of the traceability chain (upwards) and the direction of the calibration hierarchy (downwards). The arrow on the right indicates the measurement uncertainty increasing from the metrological reference to the measurement result.

2.2 Kalibrierung

Tätigkeit, die unter festgelegten Bedingungen in einem ersten Schritt eine Beziehung zwischen den durch **Normale** zur Verfügung gestellten **Größenwerten** mit ihren **Messunsicherheiten** und den entsprechenden **Anzeigen** mit ihren beigeordneten Messunsicherheiten herstellt und in einem zweiten Schritt diese Information verwendet, um eine Beziehung herzustellen, mit deren Hilfe ein **Messergebnis** aus einer Anzeige erhalten wird (VIM 2.39)

Kalibrierung wird in der chemischen Analytik häufig verbunden mit der Kalibrierung eines **Messgeräts** oder eines **Messsystems**. Typische Merkmale:

- sie beinhalten chromatographische und/oder spektrometrische Ausrüstung,
- sie benötigen eine häufige (tägliche, wöchentliche, monatliche) **Kalibrierung**,
- die **Anzeige**, d.h. das Signal des Geräts oder Systems, korrespondiert zu einer anderen **Größe** als der zu messenden, z.B. einer elektrische Ladung oder eines Potentials, anstatt der Stoffmengenkonzentration oder des Massenanteils.

Die Definition von **Kalibrierung** in VIM 3 ist zweigeteilt. Abbildung 2 zeigt den ersten Teil als **Kalibrierdiagramm** (VIM 4.30).

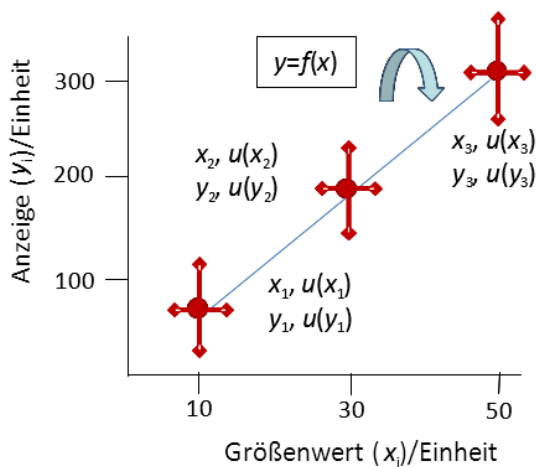


Abbildung 2 Schema des ersten Abschnitts der Definition der Kalibrierung. Anzeigen ('Signale' y_i) des Normals (Kalibriernormals) mit den Größenwerten x_i ergeben eine Beziehung (die Funktion) $y = f(x)$. Die vertikalen und horizontalen Pfeile zeigen die Standardunsicherheiten der Anzeigen- bzw. Größenwerte.

2.2 Calibration

operation that, under specified conditions, in a first step, establishes a relation between the **quantity values** with **measurement uncertainties** provided by **measurement standards** and corresponding **indications** with associated measurement uncertainties and, in a second step, uses this information to establish a relation for obtaining a **measurement result** from an indication (VIM 2.39)

Calibration in chemical analysis is frequently associated with calibrating a **measuring instrument** or **measuring system**. Typical features of these are:

- they contain chromatographic and/or spectrometric equipment;
- they need frequent (daily, weekly, monthly) **calibration**;
- the **indication**, i.e. the signal from the instrument or system, corresponds to a **quantity** other than that intended to be measured, e.g. an electric charge or potential, rather than amount of substance concentration or mass fraction.

The VIM 3 definition of **calibration** is divided into two parts, Figure 2 illustrates the first part as a **calibration diagram** (VIM 4.30).

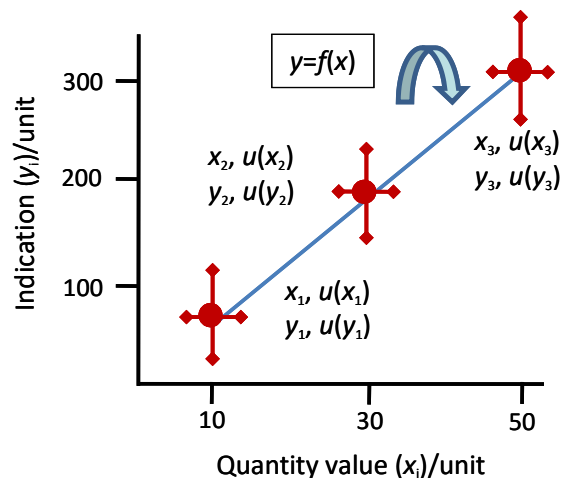


Figure 2 Schematic of the first clause of the definition of calibration. Indications ('signals' y_i) from measurement standards (calibrators) with quantity values x_i give the relation (the function) $y = f(x)$. The vertical and horizontal arrows indicate the standard uncertainties of the indication and quantity values respectively.

In einem Kalibrierexperiment stellt ein Analytiker typischerweise einen Satz von Kalibrierlösungen (auch ‚Kalibriernormale‘, ‚Standardlösungen‘ oder ‚Gebrauchsnormale‘ (VIM 5.7) genannt) her, d.h. einen Satz von **Normalen**. Bei der Messung bewirkt jedes dieser **Normalen** eine **Anzeige** („Signal“, „Response“). Die Beziehung $y = f(x)$ zwischen der **Anzeige** und dem korrespondierenden **Größenwert** wird **Kalibrierkurve** (VIM 4.31) genannt. Die **Unsicherheit** der **Kalibrierung** enthält Beiträge der **Unsicherheit** der **Normalen**, Variationen in der **Anzeige** und Einschränkungen im mathematischen Modell bei der Aufstellung der Beziehung $y = f(x)$.

Der Analytiker analysiert dann eine unbekannte Probe und nutzt die **Anzeige** (y_s), um den korrespondierenden **Größenwert** (x_s) aus der **Kalibrierkurve** zu berechnen, indem er die Funktion $w = f^{-1}(y)$ verwendet. Dieser zweite Teil der Definition ist im **Kalibrierdiagramm** in Abbildung 3 gezeigt. Wenn zum Beispiel $f(x)$ definiert ist als $a + bx$, wobei b die Steigung der Kurve und a ihr Y-Achsenabschnitt an der Stelle $x = 0$ ist, dann ist $f^{-1}(y)$ gleich $x = (y - a)/b$.

Unsicherheiten aus der **Anzeige**, der **Kalibrierung** und anderer **Korrekturen** (VIM 2.53) tragen zu der **Unsicherheit** des **Messergebnisses** bei.

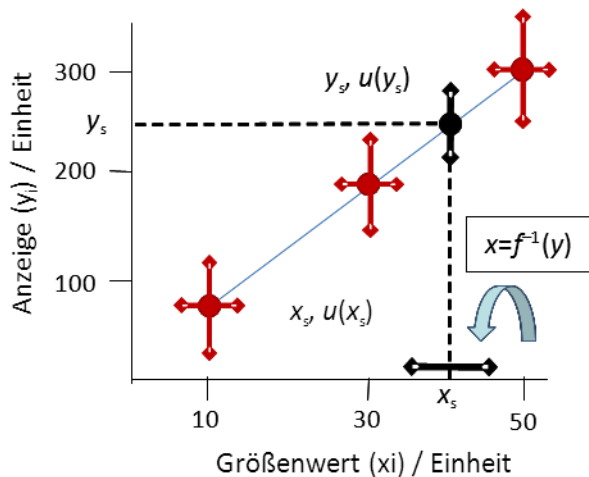


Abbildung 3 Dieses schematische Kalibrierdiagramm zeigt den zweiten Abschnitt der Definition der Kalibrierung. Die Anzeige („Signal“ y_s) einer Probe korrespondiert mit einem Größenwert x_s . Die vertikalen und horizontalen Pfeile zeigen die Standardunsicherheiten der Anzeigen- bzw. Größenwerte.

2.3 Messgerätedrift

kontinuierliche oder schrittweise zeitliche Änderung in der **Anzeige** aufgrund von Änderungen in den metrologischen Eigenschaften eines **Messgeräts** (VIM 4.21)

Die **Messgerätedrift** ist die graduelle Änderung der **Anzeige** eines Messgeräts über die Zeit. Sie kann in beide Richtungen gehen und kann über die Zeit die Richtung ändern. Die Drift wirkt sich auf die Richtigkeit der Ergebnisse aus, wenn sich die richtigen

In a calibration experiment, the analyst typically prepares a set of calibration solutions (also known as, ‘calibrators’, ‘calibrants’, ‘standard solutions’ or ‘working standards’ (VIM 5.7)), i.e. a set of **measurement standards**. When measured, each of them gives rise to an **indication** (‘signal’, ‘response’). The relation $y = f(x)$ between the **indication** and the corresponding **quantity value** is called a **calibration curve** (VIM 4.31). The **uncertainty** of the **calibration** will include contributions from the **uncertainty** of the **measurement standards**, variation in **indications**, and limitations in the mathematical model when establishing the relation $y = f(x)$.

The analyst then analyses the unknown sample and uses the **indication** (y_s) to calculate a corresponding **quantity value** (x_s) from the **calibration curve** using the function $x = f^{-1}(y)$. This second part of the definition is illustrated in the **calibration diagram** shown in Figure 3. If, for example, $f(x)$ is defined as $a + bx$, where b is the slope of the curve and a is the y -axis intercept when $x = 0$, then $f^{-1}(y)$ is $x = (y - a)/b$.

Uncertainties arising from the **indication**, the **calibration**, and of other **corrections** (VIM 2.53), contribute to the **uncertainty** of the **measurement result**.

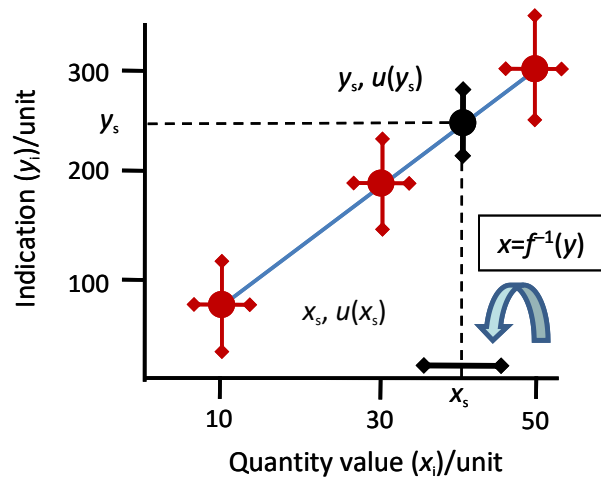


Figure 3 Schematic calibration diagram illustrating the second clause of the definition of calibration. The indication (‘signal’ y_s) from a sample corresponds to a quantity value x_s . The vertical and horizontal arrows indicate the standard uncertainty of the indication and of the quantity value respectively.

2.3 Instrumental drift

continuous incremental change over time in **indication**, due to changes in metrological properties of a **measuring instrument** (VIM 4.21)

Instrumental drift is the gradual change over time in the **indication** provided by an instrument. It can be in either direction and can change direction over time. Drift will affect the **trueness** of results if the true calibration parameters have changed between the time

Kalibrierparameter zwischen dem Zeitpunkt der Kalibrierung des Geräts und dem Zeitpunkt der Probenanalyse verändert haben. Das Ausmaß der Drift einer **Anzeige** bestimmt daher die erforderliche Häufigkeit der Rekalibrierung eines Messgeräts. In der Analytischen Chemie kann ein ‚Driftkorrekturstandard‘ mit einem bekannten **Größenwert** regelmäßig gemessen werden, um den Status der **Kalibrierung** eines Messgeräts zu überwachen und zu bestimmen, ob eine Anpassung der Konfiguration des Messgeräts oder eine Rekalibrierung notwendig ist.

2.4 Normal

Realisierung der Definition einer **Größe**, mit angegebenem **Größenwert** und beigeordneter **Messunsicherheit**, benutzt als Referenz (VIM 5.1)

Ein kommerzielles Labor überwacht regelmäßig den Gehalt an Cadmium in Trinkwasser. Die Gesetzgebung hat festgelegt, dass die zu messende **Größe** die Massenkonzentration sein sollte. Für die **Kalibrierung** des Messgeräts nutzt das Labor ein **ZRM** (VIM 5.14), bei dem laut Zertifikat der Wert für die Massenkonzentration von Cadmium $(1005 \pm 3) \text{ mg L}^{-1}$ beträgt. In diesem Falle ist der **Größenwert** 1005 mg L^{-1} und die **erweiterte Messunsicherheit** (VIM 2.35) beträgt 3 mg L^{-1} . Das **ZRM** ist ein Beispiel eines **Normals**.

Normale werden in allen wissenschaftlichen Bereichen verwendet. **Maßverkörperungen** (VIM 3.6), z.B. ein Messkolben, **ZRM** und ein **Messsystem** (z.B. ein Referenzthermometer) können als **Normal** fungieren. Wenn Analytiker von **Kalibriernormal** oder Kalibrierlösung sprechen, meinen Sie einfach ein in der **Kalibrierung** verwendetes **Normal**.

2.4.1 Eine Hierarchie von Normalen

Für Eigenschaften und Anwendungen von **Normalen** werden viele Benennungen verwendet. Abbildung 4 zeigt die Beziehungen zwischen den Typen von **Normalen**.

Das ‘Vienna Standard Mean Ocean Water’ (VSMOW2) ist ein **Internationales Normal** (VIM 5.2) für differentielle **Messungen** der Verhältnisse stabiler Isotope. Viele Metrologieinstitute besitzen eine Kopie des früheren internationalen Kilogramm-Prototyps, die als **Nationales Normal** (VIM 5.3) für die Masse dient. Gemäß VIM 3 kann ein Chemiker durch genaues Wägen und Lösen von Glukose bekannter Reinheit in bekanntem Volumen ein **Primärnormal** in der Form einer Lösung bekannter Konzentration herstellen.

the instrument was calibrated and the time test samples are analysed. The extent to which an **indication** drifts therefore determines the required frequency of recalibration of the instrument. In analytical chemistry, a ‘drift correction standard’ with a known **quantity value** can be measured regularly to monitor the state of **calibration** of an instrument and determine whether adjustment to the configuration of the instrument or recalibration is required.

2.4 Measurement standard

realization of the definition of a given **quantity**, with stated **quantity value** and associated **measurement uncertainty**, used as a reference (VIM 5.1)

A commercial laboratory regularly monitors the level of cadmium in drinking water. Legislation has specified that the **quantity** measured should be the mass concentration. For instrument **calibration** the laboratory uses a **CRM** (VIM 5.14) for which, according to the certificate, the value of the mass concentration of cadmium is $(1005 \pm 3) \text{ mg L}^{-1}$. In this case the **quantity value** is 1005 mg L^{-1} and the **expanded uncertainty** (VIM 2.35) is 3 mg L^{-1} . The **CRM** is an example of a **measurement standard**.

Measurement standards are used in all scientific areas. **Material measures** (VIM 3.6), e.g. volumetric flasks and **CRMs**, and a **measuring system** (e.g. a reference thermometer) can function as **measurement standards**. When analytical scientists talk about **calibrators** or calibrants they simply mean **measurement standards** used in **calibration**.

2.4.1 A hierarchy of measurement standards

Various terms are used to indicate properties or uses of **measurement standards**. Figure 4 shows the relationship between the types of **standard**.

The ‘Vienna Standard Mean Ocean Water’ (VSMOW2) is an **international measurement standard** (VIM 5.2) for differential stable isotope ratio **measurements**. Many NMIs have a copy of the former international prototype kilogram serving as a **national measurement standard** (VIM 5.3) for mass. According to VIM 3, by accurately weighing and dissolving glucose of known purity to a known volume, a chemist can prepare a **primary standard** in the form of a solution of known concentration.

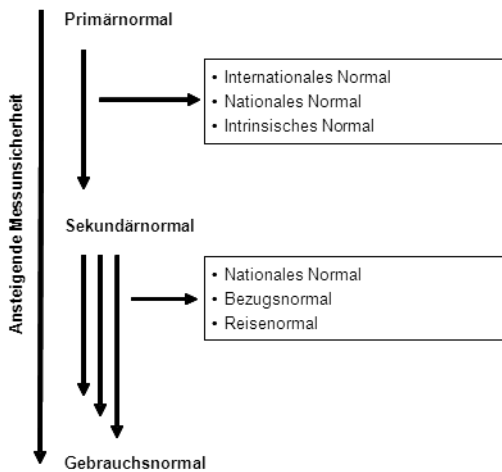


Abbildung 4 Hierarchie von Normalen

Sowohl die oben genannten Normale und **Sekundärnormale** (VIM 5.5) als auch **Bezugsnormale** (VIM 5.6) werden von den Herstellern von **RM** (VIM 5.13), Geräteherstellern und Referenzlaboratorien benötigt. Laboratorien verwenden für Routineanwendungen zusätzlich **Gebrauchsnormale** (VIM 5.7) um ihr **Messsystem** zu überprüfen.

Zwei andere Typen von **Normalen** sind noch in Abbildung 4 aufgeführt. Ein **intrinsic Normal** (VIM 5.10) ist ein **Normal**, das auf inhärenten physikalischen Konstanten oder inhärenten physikalischen Eigenschaften basiert. Zum Beispiel ist der Tripelpunkt einer Wasserzelle ein **intrinsic Normal** für die thermodynamische Temperatur. Ein **Reisenormal** (VIM 5.8) ist einfach ein **Normal** für den Transport zwischen verschiedenen Orten.

2.5 Kalibriernormal

bei der **Kalibrierung** verwendetes **Normal** (VIM 5.12)

Analytische Wissenschaftler verwenden die Begriffe **Kalibriernormal** oder **Standard**, wenn Sie sich auf ein in der **Kalibrierung** verwendetes **Normal** beziehen. Viele Messungen werden mit **Messgeräten** und **-systemen** gemacht, die eine regelmäßige **Kalibrierung** benötigen. Es ist daher ein integraler Bestandteil der täglichen Arbeit von Analytikern, solche Arten von **Normalen** herzustellen und/oder zu warten.

Normale werden für verschiedene Zwecke hergestellt und benutzt. Es gibt eine Anzahl von Dokumenten, die eine Anleitung zur Auswahl geeigneter **Normale** bieten, z.B. Lit. 27. Nicht alle Materialien, die von Lieferanten und Herstellern als **Normale** beschrieben werden, können für die **Kalibrierung** verwendet werden. Nutzer müssen Vorsicht walten lassen, wenn sie ‚Standards‘ kaufen, weil der Hersteller die Anforderungen ggf. anders als in VIM 3 interpretiert.

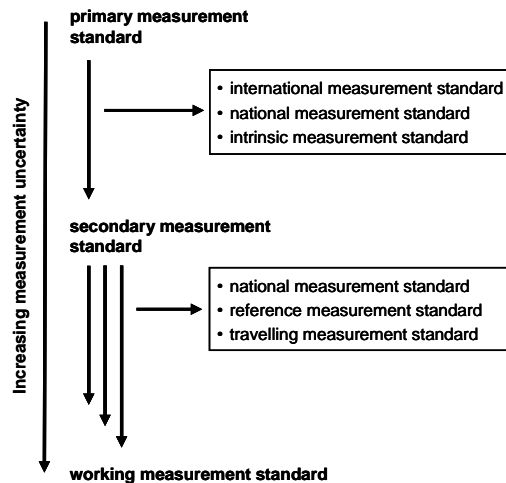


Figure 4 Illustration of hierarchy of measurement standards.

The standards mentioned above and **secondary measurement standards** (VIM 5.5) as well as other **reference measurement standards** (VIM 5.6) are needed by producers of **RMs** (VIM 5.13), instrument manufacturers and reference laboratories. In addition, for routine applications laboratories may use **working standards** (VIM 5.7) to check **measuring systems**.

Two other types of **measurement standard** are shown in Figure 4. An **intrinsic measurement standard** (VIM 5.10) is a **measurement standard** based on an inherent physical constant or inherent physical property. For example, the triple point of water cell is an **intrinsic standard** of thermodynamic temperature. A **travelling measurement standard** (VIM 5.8) is simply a **measurement standard** intended for transport between locations.

2.5 Calibrator

measurement standard used in **calibration** (VIM 5.12)

Analytical scientists frequently use the term **calibrant**, **calibrator** or **standard** when referring to **measurement standards** used in **calibration**. Many **measurements** are made using **measuring instruments** and **systems** that require regular **calibration**. An inherent part of the daily work for the analyst is, therefore, preparation and/or maintenance of this type of **measurement standard**.

Measurement standards are produced and used for different purposes. There are a number of documents which provide guidelines on choosing appropriate **measurement standards**, for example reference 27. Not all materials described by suppliers and producers as **measurement standards** can be used for **calibration**. The user needs to exercise caution when purchasing ‘standards’ as the producer may not interpret the requirements in the same way as in VIM 3.

Viele Routine-**Messsysteme** sind so gestaltet, dass Proben ohne Isolierung oder Aufkonzentrierung des Analyten verarbeitet werden. In diesen Fällen ist es auch notwendig nachzuweisen, dass sich das Kalibriernormal in derselben Weise verhält wie die Routineproben. Dies geschieht, wenn der Hersteller oder der Nutzer die **Austauschbarkeit eines Referenzmaterials** (siehe Abschnitt 2.6) untersuchen.

Nachstehend einige Beispiele von Materialien, die von Analytikern häufig zur **Kalibrierung** verwendet werden.

- Materialien, produziert von einem Hersteller und für die **Kalibrierung** oder **Verifizierung** eines kommerziellen **Messsystems** vorgesehen, z.B. ein **Gebrauchsnormal** (VIM 5.7) mit zugewiesenem **Größenwert** und **Messunsicherheit** für die Stoffmengenkonzentration von Glukose in Humanserum, geliefert als Teil eines medizinischen Geräts zur *in-vitro*-Diagnostik.
- **RM** (VIM 5.13) und **ZRM** (VIM 5.14).
- Von einer maßgebenden Institution hergestellte Materialien, z.B.: nach einem nationalen oder internationalen Arzneibuch, die für den Gebrauch in einem begrenzten, festgesetzten Bereich vorgesehen sind.
- Von einem Labor selbst produzierte und charakterisierte Materialien, z.B. wenn keine kommerziellen Produkte verfügbar sind.

Aus praktischen Gründen wird erwartet, dass Materialien, die als **Kalibriernormale** verwendet werden, eine Angabe über die **Messunsicherheit** und die **metrologische Rückführbarkeit** haben.

Kalibriernormale sind, wie alle **ZRM**, in der Regel für einen bestimmten Verwendungszweck zertifiziert und nicht für andere Zwecke bestimmt. Einige Beispiele für Angaben zum Verwendungszweck sind unten aufgeführt.

- ‚Der Einsatzschwerpunkt dieses Materials ist die Überprüfung der **Kalibrierung** eines automatischen Dichtemessgeräts, das in der Industrie verwendet wird, um den Alkoholgehalt zu bestimmen...‘
- ‚Das Material ist in erster Linie zur **Kalibrierung** von Serum-basierten Proteinstandards und Kontrollprodukten von Organisationen gedacht, die solche Präparate für die Quantifizierung von C-reaktiven Proteinen durch Immunoassays anbieten.‘
- ‚Das Material ist in erster Linie für die **Kontrolle** der Leistungsfähigkeit des IFCC Referenzverfahrens gedacht... . Wenn das Material bei einer bestimmten Untersuchung als **Kalibriernormal** verwendet wird, sollte die Austauschbarkeit für die betreffende Untersuchung verifiziert werden.‘

ISO Guide 33 enthält eine Anleitung zur Auswahl von ZRM unter Berücksichtigung der Angaben zum Verwendungszweck [28].

Many routine **measuring systems** are designed to handle samples, without isolation or pre-concentration of the analyte. In such cases it is also necessary to demonstrate that the **calibrator** behaves in the same way as the routine samples. This is done when the manufacturer or the user investigates the **commutability of a reference material** (see section 2.6).

Below are some examples of materials frequently used by analysts when carrying out **calibration**.

- Materials produced by manufacturers and intended to be used for **calibration** or **verification** of a commercial **measuring system**, e.g. a **working measurement standard** (VIM 5.7) with assigned **quantity value** and **measurement uncertainty** for amount of substance concentration of glucose in human serum, supplied as part of an *in vitro* diagnostic medical device.
- **RMs** (VIM 5.13) and **CRMs** (VIM 5.14).
- Materials produced by authoritative bodies, e.g. a national or international pharmacopoeia, and intended to be used within a limited specified scope.
- Materials produced and characterised by the laboratory in-house, e.g. in the absence of commercial products.

For practical purposes materials used as **calibrators** are expected to have a statement of **measurement uncertainty** and **metrological traceability**.

Calibrators, like all **CRMs**, are usually certified for a particular intended use and are not intended for other purposes. Some examples of statements indicating intended use are shown below.

- ‘The primary use of this material is for checking the **calibration** of automatic density meters used in industry to determine alcoholic strength ... ‘.
- ‘The material is primarily intended to be used to **calibrate** serum-based protein standards and control products of organisations which offer such preparations for the quantification of C-reactive protein by immunoassay.’
- ‘The material is primarily intended to be used to **control** the performance of the IFCC reference procedure When the material is used as a **calibrator** in a particular assay, the commutability should be verified for the assay concerned.’

ISO Guide 33 gives guidance on the selection of CRMs, taking account of statements of intended use [28].

2.6 Austauschbarkeit eines Referenzmaterials

Eigenschaft eines **Referenzmaterials**, nachgewiesen durch das Ausmaß der Übereinstimmung von **Messergebnissen** für eine angegebene **Größe** dieses Materials, erhalten durch zwei vorgegebene **Messverfahren**, und der Beziehung zwischen den Messergebnissen für andere spezifizierte Materialien (VIM 5.15)

Der Wortlaut der Definition ist etwas verschieden von den Definitionen, die in anderen ISO Normen und Richtlinien erscheinen, aber das Prinzip ist dasselbe. Wie bereits in Abschnitt 2.5 erwähnt, ist es wichtig zu prüfen, dass das **RM** (VIM 5.13), das zum Kalibrieren ausgewählt wurde, sich in derselben Weise verhält wie die Proben. Dies wird **Austauschbarkeit eines Referenzmaterials** genannt. Die Austauschbarkeit ist besonders wichtig, wo die Methoden sehr empfindlich gegenüber der Probenmatrix oder der ‚physikalischen Form‘ des interessierenden Analyten sind.

In solchen Fällen ist die **Kalibrierung** mit genau passenden Materialien essenziell für genaue **Messergebnisse**. Die **Austauschbarkeit von Referenzmaterialien** ist auch dort von Bedeutung, wo das **Messverfahren** vom Analytiker nicht modifiziert werden kann, das verfügbare **RM** aber die Probenmatrix nicht simuliert. Medizinische Laboratorien stoßen ggf. auf dieses Problem, wenn sie Analysatoren mit **Kalibriernormalen** verwenden, die vom Hersteller geliefert werden.

Die Frage der **Austauschbarkeit** im Zusammenhang mit der Analyse klinischer Proben wird in den von der IFCC veröffentlichten Empfehlungen ausführlich erörtert [29-31]. Die in der Definition erwähnten ‚anderen spezifizierten Materialien‘ sind gewöhnlich Proben, die in einem Labor routinemäßig analysiert werden.

Das Konzept der Austauschbarkeit wird am besten beschrieben wie in Abbildung 5 graphisch dargestellt. Abbildung 5(a) beschreibt einen Fall, in dem das **Referenzmaterial** M1 austauschbar ist, wohingegen das **Referenzmaterial** in Abbildung 5(b) nicht austauschbar ist. M1, M2 und S1 repräsentieren die **Anzeige** für die **Referenzmaterialien** M1 und M2, bzw. die Probe S1. Die **Anzeige** kann ein Signal eines Instruments oder ein bestimmter **Größenwert** sein.

2.6 Commutability of a reference material

property of a **reference material**, demonstrated by the closeness of agreement between the relation among the **measurement results** for a stated **quantity** in this material, obtained according to two given **measurement procedures**, and the relation obtained among the measurement results for other specified materials (VIM 5.15)

The wording of the definition is slightly different from definitions that appear in other ISO Standards and Guides but the principle is the same. As mentioned in section 2.5 it is important to check that the **RM** (VIM 5.13) chosen as a calibrant behaves in the same way as the samples. This is termed the **commutability of a reference material**. Commutability is of particular concern where methods are very sensitive to the sample matrix or ‘physical form’ of the analyte of interest.

In such cases **calibration** with closely matching materials is essential for accurate **measurement results**. **Commutability of reference materials** is also of concern where the **measurement procedure** cannot be modified by the analyst but the **RMs** available do not simulate the sample matrix. Medical laboratories may encounter this problem when using analysers with **calibrators** supplied by the manufacturer.

The issue of **commutability** in relation to the analysis of clinical samples is discussed in detail in recommendations published by IFCC [29-31]. The ‘other specified materials’ mentioned in the definition are usually samples analysed routinely in a laboratory.

The concept of commutability is best described diagrammatically as shown in Figure 5. Figure 5(a) illustrates a case where the **reference material** M1 is commutable whereas in Figure 5(b) the **reference material** M2 is not commutable. M1, M2 and S1 represent the **indication** for the **reference materials** M1 and M2 and the sample S1, respectively. The **indication** may be an instrument signal or a particular **quantity value**

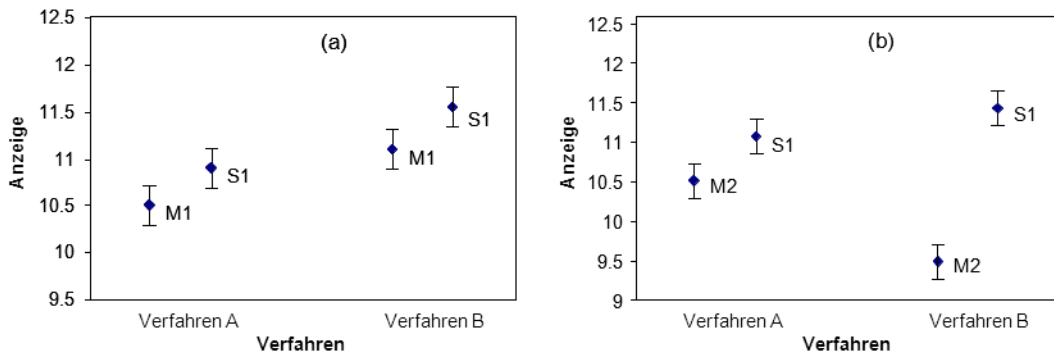


Abbildung 5 Schema zur Veranschaulichung der Austauschbarkeit eines Referenzmaterials. Die Messergebnisse und ihre zugehörigen Vertrauensbereiche werden gezeigt. Im Fall (a) wird das Referenzmaterial als austauschbar betrachtet – die Differenz zwischen der Anzeige, die für das Referenzmaterial (M1) erhalten wird und der Anzeige für die Probe (S1) verändert sich nicht zwischen den beiden Messverfahren. Im Fall (b) ist das Referenzmaterial nicht austauschbar – die Differenz zwischen der Anzeige, die für das Referenzmaterial (M2) erhalten wird und der Anzeige für die Probe (S1) ändert sich signifikant zwischen den beiden Messverfahren.

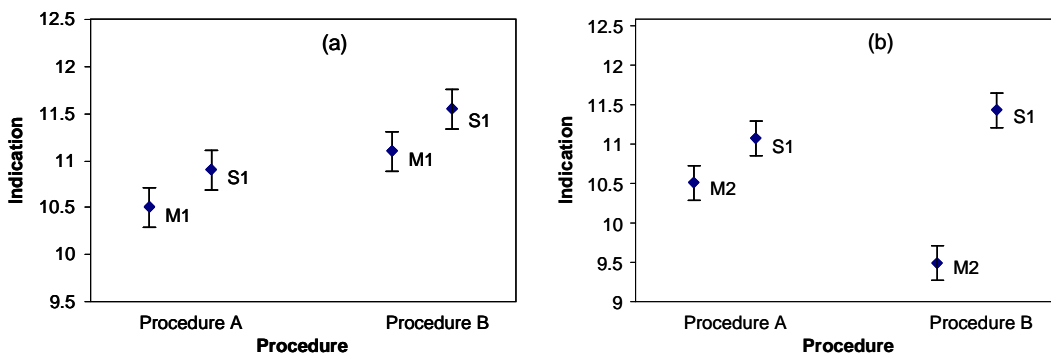


Figure 5 Schematic to illustrate the commutability of a reference material, showing the measurement results and their associated confidence intervals. In case (a) the reference material is considered to be commutable – the difference between the indication obtained for the reference material (M1) and the indication obtained for the sample (S1) does not change between the two measurement procedures. In case (b) the reference material is not commutable – the difference between the indication obtained for the reference material (M2) and the indication obtained for the sample (S1) changes significantly between the two measurement procedures.

3.0. Messunsicherheit

Dieses Kapitel beschreibt die Terminologie im Zusammenhang mit der Messunsicherheit. Der Guide to the expression of uncertainty in measurement (GUM), veröffentlicht als JGCM100 [32] und ISO/IEC Guide 98-3 [33], beschreibt die Prinzipien der Messunsicherheitsberechnungen. Weitere Information darüber, wie Messunsicherheiten berechnet werden können finden sich im EURACHEM/CITAC Guide ‚Quantifying uncertainty in analytical measurement‘ [34]. Einen Überblick über verschiedene Ansätze gibt ein Eurolab Report [35].

3.1 Messunsicherheit

nichtnegativer Parameter, der die Streuung der **Werte** kennzeichnet, die der **Messgröße** auf der Grundlage der benutzten Information beigeordnet ist (VIM 2.26)

Die **Messunsicherheit** liefert eine quantitative Angabe der Qualität eines **Messergebnisses**. Ein Synonym ist ‚*Unsicherheit*‘.

Diese Definition gibt die Tatsache wieder, dass Parameter, die zur Beschreibung der Streuung von Verteilungen benutzt werden, z.B. Standardabweichungen, gewöhnlich positiv sind. Die Aussage ‚auf der Grundlage der benutzten Information‘ erläutert, warum es notwendig ist, zu erklären, was in die Abschätzung der **Messunsicherheit** einbezogen wurde. Dies bedeutet nicht, dass wir auswählen können, was einbezogen wird und was nicht berücksichtigt werden soll. Es gibt viele Ansätze zur Abschätzung der **Messunsicherheit**. Diese sind in [36-38] beschrieben. **Messungen** bestehen aus vielen Schritten und erfordern verschiedene Ausrüstungsgegenstände. Zum Beispiel kann die Berechnung des **Messergebnisses** die Konzentrationen von Reagenzien beinhalten und die Werte von **Messgeräten**, **Kalibriernormalen** und **RM** (VIM 5.13). Alle diese Werte haben eine gewisse **Unsicherheit**, und ihre **Unsicherheiten** machen das berechnete Ergebnis unsicher. Unbekannte Eigenschaften der Probe selbst, wie mögliche Störsubstanzen, Matrixeffekte und Einflüsse auf die Wiederfindung des Analyten, und auch die Probenahme und die während der **Messung** ausgeführten, manuellen Arbeitsschritte, tragen zu der **Messunsicherheit** bei. Dies bedeutet, dass es für ein bestimmtes, berechnetes Ergebnis nicht nur einen, sondern einen ganzen Bereich von **Größenwerten** (VIM 1.19) gibt, die vernünftigerweise den **Messwert** hervorgerufen haben könnten. Die **Messunsicherheit** beschreibt die Streuung der möglichen Werte.

3.0. Measurement uncertainty

This chapter describes the terminology relating to measurement uncertainty. The Guide to the expression of uncertainty in measurement (GUM), (published as JGCM100 [32] and ISO/IEC Guide 98-3 [33]), describes the principles of uncertainty evaluation. Further information on how to evaluate measurement uncertainty can be found in the Eurachem/CITAC Guide, Quantifying uncertainty in analytical measurement [34]. An overview of the different approaches is given in a Eurolab report [35].

3.1 Measurement uncertainty

non-negative parameter characterizing the dispersion of the **quantity values** being attributed to a **measurand**, based on the information used (VIM 2.26)

Measurement uncertainty provides a quantitative indication of the quality of a **measurement result**. Synonyms are ‚*uncertainty*‘ and ‚*uncertainty of measurement*‘.

This definition expresses the fact that parameters used to describe the dispersion of distributions, e.g. standard deviations, are usually positive. The statement, ‚based on the information used‘, explains why it is necessary to declare what is included in the estimate of **measurement uncertainty**. This does not mean we can choose what to include and what to leave out. There are many approaches to evaluating **measurement uncertainty** and these are described in the literature [36-38]. **Measurements** consist of many steps and require various items of equipment. For example, calculating the **measurement result** may involve reagent concentrations and values from **measuring instruments**, **calibrators** and **RMs** (VIM 5.13). All of these values have some **uncertainty**; and their **uncertainties** will make the calculated result uncertain. Incompletely known properties of the sample itself, such as possible interferences, matrix effects and effects on analyte recovery, as well as sampling and the manual operations carried out during the **measurement**, also contribute to **measurement uncertainty**. This means that, for a specific calculated result, there is not one but a whole range of **quantity values** (VIM 1.19) that could reasonably have given rise to the **measured quantity value**. **Measurement uncertainty** describes the dispersion of these possible values.

Das **Messergebnis** besteht aus zwei quantitativen Teilen: i) dem **Messwert** und ii) der **Messunsicherheit**. Die Unsicherheit wird gewöhnlich als **erweiterte Unsicherheit** angegeben (VIM 2.35) (siehe Abschnitt 3.1.1).

Wenn das Ergebnis mit der **erweiterten Unsicherheit** angegeben wird, kann es im Format (Wert \pm Unsicherheit) und **Einheit** dargestellt werden. Zum Beispiel entspricht $(5,5 \pm 0,5)$ ml dem Intervall (5,0 - 6,0) ml (siehe Abbildung 6). Dies wird so interpretiert, dass es ein Intervall angibt, in dem der **Wert** der **Messgröße** mit einem hohen Maß an Sicherheit liegen dürfte.

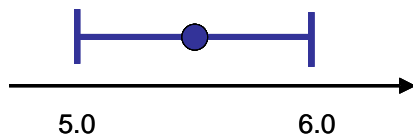


Abbildung 7 Veranschaulichung des Ergebnisses $(5,5 \pm 0,5)$ mL.

3.1.1 Angabe der Unsicherheit

Schätzungen der **Messunsicherheit** können auf verschiedene Weise, z.B. als eine Standardabweichung oder ein Vertrauensintervall angegeben werden. Um jedoch Unsicherheitsschätzungen kombinieren zu können, müssen sie in derselben Form ausgedrückt werden. Damit werden ggf. einige Umrechnungen notwendig. ISO-Richtlinien folgend sollten Unsicherheitsschätzungen als **Standardunsicherheiten** (VIM 2.30) (siehe unten) ausgedrückt werden, bevor man sie kombiniert [33].

In Analysen-Zertifikaten, Prüfberichten etc. beschreibt der Buchstabe u die **Unsicherheit**. Es gibt jedoch verschiedene Formen der **Unsicherheit**.

- $u(x_i)$ – die **Standardunsicherheit** für die Größe x_i ist eine **Unsicherheit**, ausgedrückt als Standardabweichung;
- $u(y, x_i)$ – der Beitrag zur Standardunsicherheit der Messgröße, der durch die Größe x_i verursacht wird (dies wird manchmal als der „Beitrag“ von x_i zur Unsicherheit $u(y)$ bezeichnet);
- u_c – die **kombinierte Standardunsicherheit** (VIM 2.31) für die **Messgröße**, ist eine mathematische Kombination mehrerer individueller **Standardunsicherheiten**;
- U – die **erweiterte Unsicherheit** (VIM 2.35) ist der Wert, den ein Labor normalerweise an den Kunden berichtet. Die **erweiterte Messunsicherheit** liefert ein Intervall, innerhalb dessen der Wert der Messgröße mit einem höheren Grad an Vertrauen erwartet wird. Der Wert von U wird durch Multiplikation der **kombinierten Standardunsicherheit** u_c mit einem **Erweiterungsfaktor** (VIM 2.38) k berechnet, d.h. $U = k \cdot u_c$. Die Wahl des Faktors k basiert auf dem gewünschten Grad an Vertrauen.

The **result of a measurement** consists of two quantitative parts: i) the **measured quantity value** and ii) the **measurement uncertainty**. The uncertainty is usually reported as the **expanded uncertainty** (VIM 2.35) (see section 3.1.1).

When the result is reported with the **expanded uncertainty**, it can be presented in the format (value \pm uncertainty) and **unit**. For example, (5.5 ± 0.5) mL corresponds to the interval (5.0 – 6.0) mL (see Figure 6). This is interpreted as providing an interval within which the **value** of the **measurand** is believed to lie with a high level of confidence.

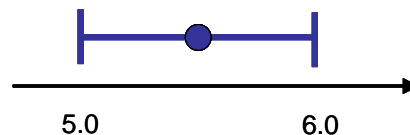


Figure 6 Illustration of the result (5.5 ± 0.5) mL.

3.1.1 Expression of uncertainty

Estimates of **measurement uncertainty** can be expressed in a number of different ways, e.g. as a standard deviation or a confidence interval. However, to be able to combine uncertainty estimates they must be expressed in the same form, so some conversion may be necessary. Following ISO guidelines, uncertainty estimates should be expressed as **standard uncertainties** (VIM 2.30) (see below) before they are combined [33].

In certificates of analysis, test reports etc., the letter u denotes **uncertainty**. However, there are different forms of **uncertainty**:

- $u(x_i)$ – the **standard uncertainty** for quantity x_i is an **uncertainty** expressed as a standard deviation;
- $u(y, x_i)$ – the contribution to the standard uncertainty of the measurand caused by the quantity x_i (this is sometimes called the ‘contribution’ of x_i to the uncertainty $u(y)$);
- u_c – the **combined standard uncertainty** (VIM 2.31) for the **measurand**, is a mathematical combination of several individual **standard uncertainties**;
- U – the **expanded uncertainty** (VIM 2.35) is normally what the laboratory reports to the customer. The **expanded uncertainty** provides an interval within which the value of the **measurand** is believed to lie with a higher level of confidence. The value of U is obtained by multiplying the **combined standard uncertainty** u_c by a **coverage factor** (VIM 2.38) k , i.e. $U = k \cdot u_c$. The choice of the factor k is based on the level of confidence desired.

Daraus folgt $u(y, x_i) < u_c < U$. Diese **Unsicherheiten** werden oft in Beziehung zum Wert ausgedrückt, z.B. als **relative Standardmessunsicherheit** (VIM 2.32).

3.1.2 Unsicherheitsermittlung

Die Gesamtleistungsfähigkeit eines **Messverfahrens** wird während der Methodenentwicklung und der **Methodenvalidierung** (siehe Kapitel 4) untersucht. Die einzelnen **Unsicherheitsquellen** werden während dieses Prozesses identifiziert und im Detail untersucht, wenn festgestellt wird, dass sie im Hinblick auf die Gesamtanforderungen signifikant sind. Es wird das Ziel des Labors sein, Quellen für signifikante **Unsicherheiten** so weit zu eliminieren, bis das **Messverfahren** als geeignet für den Anwendungszweck betrachtet werden kann. Dies bedeutet, dass das Labor die maximale **Messunsicherheit**, die für den Kunden für eine bestimmte Anwendung akzeptabel ist, kennen sollte. Diese wird **Höchstwert der Messunsicherheit** (Zielmessunsicherheit) (VIM 2.34) genannt. Zum Beispiel fordert die EU-Gesetzgebung für das amtliche Monitoring des Zustands von Oberflächen- und Grundwasser, dass die Laboratorien, die die **Messungen** ausführen, **Messverfahren** verwenden sollen, die **Ergebnisse** liefern mit einer geschätzten **Messunsicherheit** von höchstens 50 % ($k = 2$) an der jeweiligen Umweltqualitätsnorm [39]. Die Umweltqualitätsnorm für Blei in Oberflächenwasser ist zum Beispiel $7,2 \mu\text{g L}^{-1}$, damit ist der **Höchstwert der Messunsicherheit** (Zielmessunsicherheit) $3,6 \mu\text{g L}^{-1}$ [40]. Ein Eurachem/CITAC-Leitfaden [16] gibt einen Überblick über die möglichen Ansätze zur Festlegung des **Höchstwerts der Messunsicherheit** (Zielmessunsicherheit) in verschiedenen Szenarien.

Während der **Validierung/Verifizierung** eines **Messverfahrens** werden die gesamte **Messpräzision** der Methode und die **Unsicherheit des Bias der Messung** (VIM 2.18) oft ermittelt. In vielen Fällen liefert die Kombination dieser zwei **Unsicherheitskomponenten** nach dem Gesetz der Unsicherheitsfortpflanzung einen vernünftigen Schätzwert für die **Standardunsicherheit** des Ergebnisses bei der Anwendung des **Messverfahrens** [34-38]. Da die **Messunsicherheit** auf unterschiedliche Weise geschätzt werden kann, sollte der sich ergebende Wert mit einer Erläuterung oder einem Verweis auf verfügbare Information versehen werden, wie die Unsicherheit ermittelt wurde. Der Kunde ist dann in der Lage, die **Unsicherheit** zu interpretieren (siehe auch Abschnitt 3.2).

It follows that $u(y, x_i) < u_c < U$. These **uncertainties** are often expressed in relation to the value, e.g. as a **relative standard measurement uncertainty** (VIM 2.32).

3.1.2 Uncertainty evaluation

The overall performance of a **measurement procedure** is studied during method development and method **validation** (see chapter 4). Individual sources of **uncertainty** will be identified during this process and studied in detail if they are found to be significant compared to the overall requirements. The laboratory will aim to remove sources of significant **uncertainty** until the **measurement procedure** is deemed to be fit for purpose. This means that the laboratory should know the maximum **measurement uncertainty** that can be accepted by the customer for a specific application. This is called the **target measurement uncertainty** (VIM 2.34). For example, the EU legislation regarding the official control for monitoring the status of surface waters and groundwater states that laboratories performing **measurements** should use **measurement procedures** capable of providing **results** with an '**uncertainty of measurement** of 50% or below ($k = 2$) estimated at the level of the relevant environmental quality standard' [39]. For example, the environmental quality standard for lead in surface waters is $7.2 \mu\text{g L}^{-1}$ so the **target measurement uncertainty** is $3.6 \mu\text{g L}^{-1}$ [40]. A Eurachem/CITAC Guide [16] provides an overview of the possible approaches to setting the **target measurement uncertainty** in various different scenarios.

During **validation/verification** of a **measurement procedure** the overall **measurement precision** of the method and the **uncertainty of the measurement bias** (VIM 2.18) are often evaluated. In many cases combining these two **uncertainty** components using the law of propagation gives a reasonable estimate of the **standard uncertainty** of the results obtained when using the **measurement procedure** [34-38]. Since **measurement uncertainty** can be estimated in different ways, the resulting value should be accompanied by an explanation, or by reference to available information, of how the uncertainty was evaluated. The customer is then in a position to interpret the **uncertainty** (see also section 3.2).

Das kleinstmögliche Niveau an **Unsicherheit**, das mit einem **Messergebnis** verbunden ist, ist in der Definition der **Messgröße** impliziert (**Eigenunsicherheit**, VIM 2.27). Zum Beispiel hat die **Messgröße** ‚Volumen einer Flüssigkeit in einem Messkolben‘ eine größere **Eigenunsicherheit** als die **Messgröße** ‚Volumen an Wasser in einem Messkolben bei 20 °C‘. Im ersten Fall sind weder die Art der Flüssigkeit noch die Temperatur der Flüssigkeit spezifiziert. Die **Eigenunsicherheit** hängt von der Fähigkeit des Analytikers ab, die **Messgröße** angemessen zu definieren. Wie viel Aufwand man auch immer in die **Messung** stecken mag, die **Eigenunsicherheit** kann dadurch nicht verringert werden, es sei denn, es würde eine detailliertere Definition der **Messgröße** gegeben. Zum Beispiel ist die **Eigenunsicherheit** der **Messung** von Gesamtprotein in einer Milchprobe größer als die **Eigenunsicherheit** der Verteilung von Einzelproteinfraktionen in der Milchprobe. Es ist gute Praxis, die **Messgröße** so zu definieren, dass die **Eigenunsicherheit** für den Zweck der Messung vernachlässigbar ist.

3.2 Messunsicherheitsbilanz

Angabe einer **Messunsicherheit**, der Komponenten dieser Messunsicherheit und ihrer Berechnung und Kombination (VIM 2.33)

Wenn **Messunsicherheiten** ermittelt werden, wird die Information über verschiedene Unsicherheitsquellen oft in einer **Messunsicherheitsbilanz** zusammengefasst. Das Wort ‚Budget‘ in der englischen Fassung wird nicht im gewöhnlichen Sinne verwendet; es ist keine Obergrenze für die **Messunsicherheit**; es ist eine Angabe der **Unsicherheitsquellen** und ihrer Werte. Die Bilanz enthält auch das **Modell der Messung** (VIM 2.48) und kann auch die Art der **Unsicherheitsermittlung** für jeden Beitrag beinhalten. Zwei Methoden der Unsicherheitsermittlung sind im VIM 3 und im ISO Guide to the expression of uncertainty in measurement [33] definiert. Ein **Unsicherheitsbeitrag** basierend auf der statistischen Analyse von **Größenwerten**, die unter bestimmten Bedingungen gewonnen wurden, resultiert aus der **Ermittlungsmethode A** (VIM 2.28). Ein Beitrag der auf anderen Wegen ermittelt wurde, resultiert aus der **Ermittlungsmethode B** (VIM 2.29). Ein Beispiel für die **Ermittlungsmethode A** ist die Standardabweichung des Mittelwerts der Ergebnisse von zehn unter **Wiederholbedingungen** (VIM 2.20) durchgeführten Messungen. Ein **Unsicherheitswert** aus einem Zertifikat eines **RM** (VIM 5.13) ist ein Beispiel für die **Ermittlungsmethode B**. Die **Unsicherheitsbilanz** kann auch die angenommene Wahrscheinlichkeitsverteilung und (sofern angemessen) die Freiheitsgrade für jeden **Unsicherheitsbeitrag** beinhalten sowie den **Erweiterungsfaktor** (VIM 2.38), der zur Berechnung der **erweiterten Unsicherheit** (VIM 2.35) verwendet wurde.

The minimum level of **uncertainty** associated with a given **measurement result** is implicit in the definition of the **measurand** (**definitional uncertainty**, VIM 2.27). For example, the **measurand**, ‘volume of liquid contained in a volumetric flask’ has a larger **definitional uncertainty** than the **measurand**, ‘volume of water contained in a volumetric flask at 20 °C’. In the case of the former neither the nature of the liquid nor the temperature of liquid are specified. The **definitional uncertainty** depends on the analyst’s ability to define the **measurand** adequately. No matter how much effort is put into the **measurement**, the **definitional uncertainty** cannot be reduced unless a new, more detailed definition of the **measurand** is given. For example, the **definitional uncertainty** associated with the **measurement** of the total amount of protein in a milk sample will be larger than the **definitional uncertainty** associated with the distribution of individual protein fractions in the milk sample. It is good practice to define the **measurand** in such a way that the **definitional uncertainty** is negligible for the purposes of the measurement.

3.2 Uncertainty budget

statement of a **measurement uncertainty**, of the components of that measurement uncertainty, and of their calculation and combination (VIM 2.33)

When evaluating **measurement uncertainty**, information about the different sources of uncertainty and their combination is often summarised in an **uncertainty budget**. The word ‘budget’ is used in a different sense from that in common usage; it is not an upper limit of **measurement uncertainty**; it is a statement of the sources of **uncertainty** and their values. An **uncertainty budget** includes the **measurement model** (VIM 2.48) and may also show the type of **uncertainty** evaluation used for each contribution. Two types of uncertainty evaluation are defined in VIM 3 and the ISO Guide to the expression of uncertainty in measurement [33]. An uncertainty contribution based on statistical analysis of **quantity values** obtained under defined conditions is a **Type A evaluation** (VIM 2.28). A contribution obtained by any other means is a **Type B evaluation** (VIM 2.29). An example of **Type A evaluation** is the standard deviation of the mean of the results from ten replicate **measurements** performed under **repeatability conditions** (VIM 2.20). An **uncertainty** value taken from a **RM** (VIM 5.13) certificate is an example of a **Type B evaluation**. The **uncertainty budget** may also include the probability distribution assumed and (where appropriate) degrees of freedom for each **uncertainty** contribution, and the **coverage factor** (VIM 2.38) used to calculate the **expanded uncertainty** (VIM 2.35).

Ein Beispiel für die **Unsicherheitsbilanz** für die Massenkonzentration eines Cadmium-Kalibrierstandards wird in Tabelle 2 gezeigt. Sie basiert auf einem Beispiel aus dem EURACHEM/CITAC Leitfaden [34]. Die Massenkonzentration von Cadmium, ρ_{Cd} (mg L⁻¹) ist gegeben durch:

$$\rho_{Cd} = (1000 \cdot m \cdot p) / V$$

wobei m die Masse Cadmium in mg ist, p seine Reinheit und V das Volumen des Messkolbens in mL. Jeder dieser Terme trägt zur **Unsicherheit** der berechneten Konzentration der Lösung bei, wie in der **Unsicherheitsbilanz** in Tabelle 2 gezeigt wird. Die **Unsicherheit** der Masse wird dem Kalibrierzertifikat entnommen, das ein akkreditiertes Kalibrierlabor zur Verfügung stellt, und aus seinen Empfehlungen zur Schätzung der **Unsicherheit** unter den Einsatzbedingungen. Die Reinheit des Metalls wird den Begleitinformationen des Herstellers entnommen und in eine **Standardunsicherheit** (VIM 2.30) umgerechnet, wobei eine Rechteckverteilung angenommen wird. Die **Unsicherheit** des Kolbenvolumens besteht aus drei Komponenten – der **Kalibrierung** (u_{cal}), der **Wiederholbarkeit** (VIM 2.21) des Kolbenfüllens (u_{rep}) und der Differenz zwischen der Temperatur, bei der die Kalibrierung gemacht wurde und der Temperatur, bei der der Kolben verwendet wird (u_{temp}).

Ein Beispiel für eine Unsicherheitsbilanz für ein Prüfverfahren zur Bestimmung der Massenkonzentration von Ammoniumstickstoff NH₄-N in Wasser, das in einem einzelnen Labor validiert wurde, ist in Tabelle 3 dargestellt.

An example of an **uncertainty budget** for the mass concentration of a cadmium calibration standard is shown in Table 2. It is based on an example from the Eurachem/CITAC Guide [34]. The mass concentration of cadmium, ρ_{Cd} (mg L⁻¹) is given by:

$$\rho_{Cd} = (1000 \cdot m \cdot p) / V$$

where m is the mass in mg of cadmium, p its purity, and V the volume of the flask in mL. Each of these terms will introduce **uncertainty** in the calculated concentration of the solution, as shown in the **uncertainty budget** in Table 2. The **uncertainty** in the mass is obtained from the calibration certificate provided by an accredited calibration laboratory and their recommendations on the estimation of the **uncertainty** under the conditions of use. The purity of the metal is obtained from accompanying information available from the producer and converted to a **standard uncertainty** (VIM 2.30) assuming a rectangular distribution. The **uncertainty** in the volume of the flask consists of three components – **calibration** (u_{cal}), **repeatability** (VIM 2.21) of filling the flask (u_{rep}), and the difference between the temperature at which the calibration was made and the temperature when the flask is used (u_{temp}).

An example of an uncertainty budget for a test method for the determination of the mass concentration of ammonium nitrogen NH₄-N in water, validated in a single laboratory, is shown in Table 3.

Tabelle 2 Unsicherheitsbilanz für die Massenkonzentration einer Cadmium-Kalibrierlösung; die Werte sind dem Eurachem/CITAC Leitfaden [34] entnommen. Die Standardunsicherheit von ρ_{Cd} wurde durch Kombination der relativen Standardmessunsicherheiten und Multiplikation mit dem Wert von ρ_{Cd} berechnet. Die Standardunsicherheit des Volumens V wurde durch Kombination der Standardmessunsicherheiten berechnet

Größe	Wert	Standardunsicherheit, $u(x_i)$	Einheit	Relative Standardunsicherheit, $u(x_i)/x_i$
m	100,28	0,050	mg	0,00050
P	0,9999	$5,8 \times 10^{-5}$	g/g	$5,8 \times 10^{-5}$
V^*	100,00	0,066	mL	0,00066
ρ_{Cd}	1002,70	0,84	mg L ⁻¹	0,00083
Erweiterte Unsicherheit $k = 2$		1,7	mg L ⁻¹	
*Volumenbeiträge		Standardunsicherheit	Einheit	Relative Standardunsicherheit, $u(x_i)/x_i$
	u_{cal}	0,041	mL	0,00041
	u_{temp}	0,049	mL	0,00048
	u_{rep}	0,020	mL	0,00020
Volumen, kombinierte Standardunsicherheit		0,066	mL	0,00066

Table 2 Uncertainty budget for the mass concentration of a cadmium calibration standard; values taken from the Eurachem/CITAC Guide [34]. The standard uncertainty in ρ_{Cd} was calculated by combining the relative standard measurement uncertainties and then multiplying by the value for ρ_{Cd} . The standard uncertainty in the Volume V was calculated by combining the standard measurement uncertainties

Quantity	Value	Standard uncertainty, $u(x_i)$	Unit	Relative standard uncertainty, $u(x_i)/x_i$
m	100.28	0.050	mg	0.00050
P	0.9999	5.8×10^{-5}	g/g	5.8×10^{-5}
V^*	100.00	0.066	mL	0.00066
ρ_{Cd}	1002.70	0.84	mg L ⁻¹	0.00083
Expanded uncertainty $k = 2$		1.7	mg L ⁻¹	
*Volume contributions		Standard uncertainty	Unit	Relative standard uncertainty, $u(x_i)/x_i$
	u_{cal}	0.041	mL	0.00041
	u_{temp}	0.049	mL	0.00048
	u_{rep}	0.020	mL	0.00020
Volume, combined standard uncertainty		0.066	mL	0.00066

Tabelle 3 Unsicherheitsbilanz für die Massenkonzentration von Ammoniumstickstoff NH₄-N in Wasser. Die Werte stammen aus dem Nordtest-Handbuch [38]. Die relative Standardmessunsicherheit für die Präzision unter Zwischenbedingungen ($u(P)$) wird mit der relativen Standardmessunsicherheit für die Bias-Schätzung ($u(bias)$) kombiniert. Die erweiterte Unsicherheit wird mit einem Erweiterungsfaktor von $k = 2$ angegeben

Konzentrationsbereich (µg/l)	Schätzung der Präzision unter Zwischenbedingungen	$u(P)$	Schätzung der mit dem Bias verbundenen Unsicherheit	$u(bias)$	Kombinierte Unsicherheit	Erweiterte Unsicherheit
50-500	Kontrollprobe, die den gesamten analytischen Prozess abdeckt	1,67 %	Eignungsprüfungen	2,73 %	3,20 %	6,4 %

Table 3 Uncertainty budget for the mass concentration of ammonium nitrogen NH₄-N in water. Values taken from the Nordtest Handbook [38]. The relative standard measurement uncertainty for the intermediate precision ($u(P)$) is combined with the relative standard measurement uncertainty associated with the bias estimate ($u(bias)$). The expanded uncertainty is given with a coverage factor of $k = 2$

Concentration range (µg/l)	Estimate of intermediate precision	$u(P)$	Estimate of uncertainty associated with bias	$u(bias)$	Combined uncertainty	Expanded uncertainty
50-500	Control sample covering the whole analytical process	1.67 %	Proficiency tests	2.73 %	3.20 %	6.4 %

4.0. Verifizierung, Validierung und Leistungsfähigkeit von Methoden

Dieses Kapitel beschreibt die Terminologie in Bezug auf die Verifizierung, Validierung und die Leistungsfähigkeit von Methoden. Weitere Information über Methodvalidierung findet sich in dem Eurachem Guide „Fitness for purpose of analytical methods“ [41]

4.1 Verifizierung und Validierung

Der VIM definiert die Verifizierung wie folgt:

Erbringung eines objektiven Nachweises, dass eine Betrachtungseinheit die spezifizierten Anforderungen erfüllt (VIM 2.44)

Nach der VIM-Definition ist **Validierung** ein spezieller Fall der Verifizierung.

Verifizierung, wobei die spezifizierten Anforderungen für den beabsichtigten Zweck angemessen sind (VIM 2.45)

Wenn man die Begriffe **Verifizierung** und **Validierung** zusammenfasst, beinhaltet der Prozess der **Validierung** die Vereinbarung von „spezifizierten Anforderungen“ für Leistungsmerkmale wie **Selektivität**, **Messbereich**, **Richtigkeit** und **Präzision**, die für die beabsichtigte Verwendung des **Messverfahrens** angemessen sind, mit dem Kunden und die anschließende Bestätigung auf der Grundlage objektiver Beweise, dass diese erfüllt sind (**Verifizierung**).

Um die Beziehung zwischen **Verifizierung** und **Validierung** zu illustrieren, betrachten wir ein Beispiel, in dem ein Labor ein Gerät beschafft. Nachdem das Gerät im Labor installiert wurde, plant ein Analytiker eine Reihe von Experimenten, um zu prüfen, ob die Leistungsfähigkeit des Geräts den Spezifikationen des Herstellers entspricht. Dieses Verfahren wird **Verifizierung** genannt – der Analytiker möchte einen objektiven Nachweis (experimentelle Daten), der zeigt, dass das Gerät die Spezifikation des Herstellers erfüllt. Sobald bestätigt wurde, dass die Leistungsfähigkeit des Geräts zufriedenstellend ist, wird es als Teil eines bestimmten **Messverfahrens** eingesetzt. Die Leistungsanforderungen an das **Messverfahren** wurden durch das Labor spezifiziert und mit dem Kunden als angemessen für den beabsichtigten Gebrauch abgestimmt. Der Analytiker plant einen neuen Satz von Experimenten, um die Leistungsfähigkeit des **Mess-**

4.0. Verification, Validation and Method Performance

This chapter describes the terminology relating to verification, validation and method performance. Further information on method validation can be found in the Eurachem guide on the fitness for purpose of analytical methods [41].

4.1 Verification and Validation

VIM defines **verification** as follows.

provision of objective evidence that a given item fulfils specified requirements (VIM 2.44)

According to the VIM definition, **validation** is a special case of verification.

verification, where the specified requirements are adequate for an intended use (VIM 2.45)

Taking the concepts of **verification** and **validation** together, the process of **validation** involves agreeing with the customer ‘specified requirements’ for performance characteristics such as **selectivity**, **measuring interval**, **trueness** and **precision** that are adequate for the intended use of the **measurement procedure**, and then confirming, on the basis of objective evidence, that they are fulfilled (**verification**).

In order to illustrate the relationship between **verification** and **validation**, consider an example where a laboratory purchases an instrument. After the instrument has been installed in the laboratory, an analyst plans a series of experiments to check that the instrument’s performance meets that specified by the manufacturer. This process is called **verification** – the analyst will obtain objective evidence (experimental data) which demonstrates that the instrument meets the manufacturer’s specification. Once it has been confirmed that the instrument performance is satisfactory it will be used as part of a particular **measurement procedure**. The performance requirements for the procedure are specified by the laboratory and agreed with the customer as being fit for the intended purpose. The analyst plans a new set of experiments to assess the performance of the **measurement procedure**, and checks that it meets the customer requirements. This process is called **validation**.

verfahrens zu bewerten, und prüft, ob es die Kundenanforderungen erfüllt. Dieser Prozess wird **Validierung** genannt.

4.1.1 Verifizierung eines validierten Verfahrens

Wenn ein zuvor validiertes Verfahren (z. B. ein Normverfahren) verwendet wird, muss das Laboratorium objektiv nachweisen, dass die angegebenen Leistungsmerkmale des Verfahrens erreicht werden können. Betrachten Sie das folgende Beispiel.

Ein Labor wird von einem Kunden gebeten, eine **Messung** des Massenanteils von Acrylamid in Backwaren, wie Brot und Keksen, durchzuführen. In einem ersten Schritt vereinbart das Laboratorium mit dem Kunden die Messanforderungen in Bezug auf den Arbeitsbereich und die **erweiterte Unsicherheit** (VIM 2.35). Dann prüft es, ob es ein Standardverfahren gibt, das in Ringversuchen bewiesen hat, dass es die Anforderungen für den vorgesehenen Verwendungszweck erfüllt. Es stellt fest, dass die Verfahren EN 16618:2015 „Bestimmung von Acrylamid in Lebensmitteln durch Flüssigchromatographie-Tandem-Massenspektrometrie (LC-ESI-MS/MS)“ Backwaren in seinem Anwendungsbereich abdeckt und dass sowohl der Arbeitsbereich als auch die **erweiterte Unsicherheit** die vereinbarten Anforderungen für die beabsichtigte Verwendung erfüllen. Das Labor muss dann durch eine experimentelle Bewertung verifizieren, dass die angegebene Leistung des Verfahrens erreicht werden kann.

Die folgenden Abschnitte beschreiben die Leistungsdaten, definiert in VIM 3, die gewöhnlich bei einer **Verifizierung/Validierung** untersucht werden.

4.2 Selektivität eines Messsystems

Eigenschaft eines **Messsystems**, das mit einem vorgeschriebenen **Messverfahren** eingesetzt wird, wobei es **Messwerte** für eine oder mehrere **Messgrößen** in der Weise liefert, dass die Werte jeder Messgröße von anderen Messgrößen oder anderen **Größen** im untersuchten Phänomen, im untersuchten Körper oder in der untersuchten Substanz unabhängig sind (VIM 4.13)

Die Definition von **Selektivität** in VIM 3 ist konsistent mit der bekannteren Definition der IUPAC: „Das Ausmaß, in dem das Verfahren verwendet werden kann, um bestimmte Analyten in Gemischen oder Matrices zu bestimmen, ohne dass andere Komponenten mit ähnlichem Verhalten stören. [42].

So würde beispielsweise die Gaschromatographie mit einem Massenspektrometer als Detektor (GC-MS) als selektiver gelten als die Gaschromatographie mit einem Flammenionisationsdetektor (GC-FID), da

4.1.1 Verification of a validated method

In the case where a method that has been validated previously (e.g. a standard method) is being used, the laboratory has to provide objective evidence that the stated performance characteristics of the method can be achieved. Consider the following example.

A laboratory is asked by a customer to perform a **measurement** of the mass fraction of acrylamide in bakery products, such as bread and biscuits. As a first step, the laboratory agrees with the customer the **measurement** requirements in terms of working range and **expanded uncertainty** (VIM 2.35). Then, it checks if a standard method exists, that has been proven, by interlaboratory studies, to fulfil the requirements for the intended use. It finds that the method EN 16618:2015 ‘Determination of acrylamide in food by liquid chromatography tandem mass spectrometry (LC-ESI-MS/MS)’ covers bakery products in its scope, and that both the working range and the **expanded uncertainty** fulfil the agreed requirements for the intended use. The laboratory must then verify, via an experimental assessment, that the stated method performance can be achieved.

The following sections describe the performance characteristics defined in VIM 3 which are commonly studied during **verification/validation**.

4.2 Selectivity of a measuring system

property of a **measuring system**, used with a specified **measurement procedure**, whereby it provides measured **quantity values** for one or more **measurands** such that the values of each measurand are independent of other measurands or other **quantities** in the phenomenon, body, or substance being investigated (VIM 4.13)

The definition of **selectivity** in VIM 3 is consistent with the more familiar definition proposed by IUPAC: ‘the extent to which the method can be used to determine particular analytes in mixtures or matrices without interferences from other components of similar behaviour.’ [42].

For example, gas chromatography using a mass spectrometer as the detector (GC-MS) would be considered more selective than gas chromatography using a flame ionisation detector (GC-FID), as the mass spectrometer provides additional information which assists with confirmation of identity.

das Massenspektrometer zusätzliche Informationen liefert, die bei der Identitätsbestätigung helfen.

Die Verwendung des Begriffs „Spezifität“ wird von der IUPAC nicht empfohlen und ist in VIM 3 nicht definiert.

4.3 Messbereich

Menge von **Werten** von **Größen** derselben **Art**, die unter definierten Bedingungen gemessen werden können, und zwar mit einem speziellen **Messgerät** oder **Messsystem** mit einer vorgegebenen **Geräte-messunsicherheit** (VIM 4.7)

Innerhalb eines **Messbereichs** kann eine **Größe** (z.B. Massenkonzentrationen) mit einer vorgegebenen **Unsicherheit** mit einem genannten **Messverfahren** gemessen werden. Andere Ausdrücke, die gewöhnlich für diesen Begriff verwendet werden, sind: ‚Arbeitsbereich‘ oder ‚Bereich‘.

Anm. d. Übers.: Die hier folgende Diskussion über die englischen Ausdrücke ‚interval‘ und ‚range‘ betreffen nicht die deutsche Sprachfassung des VIM 3.

Als Untergrenze des **Messbereichs** wird häufig die Bestimmungsgrenze (BG) (ein Begriff, der im VIM 3 nicht definiert ist) betrachtet. Die Obergrenze wird gewöhnlich durch eine nicht akzeptable Veränderung der **Messunsicherheit** oder **Empfindlichkeit** (VIM 4.12) bestimmt, zum Beispiel der Plateau-Effekt, der bei hohen Absorptionswerten in der UV/VIS-Spektroskopie beobachtet wird. Abbildung 7 zeigt die Beziehungen einiger der Schlüsselbegriffe im Zusammenhang mit dem ‚**Messbereich**‘. Der lineare Bereich ist die Menge der gemessenen Größenwerte, für die die Linearität eines Messsystems gilt. Die NWG liegt unter der BG. Der Messbereich sollte mit den analytischen Anforderungen vereinbar und daher für den Zweck geeignet sein. Wenn z. B. zu erwarten ist, dass der Analytgehalt in den Proben deutlich über der BG liegt, muss das Labor möglicherweise nicht den gesamten in Abbildung 7 dargestellten Bereich abdecken.

Viele Methoden beruhen darauf, dass die im Labor erhaltene Probe aufbereitet (z. B. aufgeschlossen, extrahiert, verdünnt) wird, bevor sie ins **Messgerät** gebracht und ein Signal aufgezeichnet werden kann. In solchen Fällen sind zwei **Messbereiche** zu berücksichtigen - der Geräte-**Messbereich** (beschrieben in der VIM-Definition) und der Verfahrens-**Messbereich** für das gesamte **Messverfahren** (einschließlich aller Probenvorbereitungsschritte). Die Bewertung dieser unterschiedlichen Messbereiche wird im Eurachem-Leitfaden [41] ausführlich diskutiert.

The use of the term specificity is not recommended by IUPAC and is not defined in VIM 3.

4.3 Measuring interval

set of **values** of **quantities** of the same **kind** that can be measured by a given **measuring instrument** or **measuring system** with specified **instrumental measurement uncertainty**, under defined conditions (VIM 4.7)

Within the **measuring interval**, a **quantity** (e.g. mass concentration) can be measured with a specified **uncertainty** using a stated **measurement procedure**. The other phrases commonly used for this concept are: ‘working range’ and ‘measurement range’ (the latter is used in ISO/IEC 17025 [4]). The common usage of the term ‘measurement range’ or ‘measuring range’ to denote **measuring interval** is acknowledged in Note 1 of the VIM definition. However, it should be noted that in VIM 3, the term ‘interval’ denotes a set of numbers defined by its end values whereas the term ‘range’ or ‘range of interval’ is restricted to the difference between the highest and the lowest values of an interval. Following these conventions, in the example shown in Figure 7 the **measuring interval** is 0.3 to 0.8 (inclusive), which is written as [0.3, 0.8], and the range is 0.5.

The lower limit of the **measuring interval** is often considered to be the limit of quantification (LOQ) (a concept not defined in VIM 3). The upper limit is usually determined by the unacceptable change in **measurement uncertainty** or in the **sensitivity** (VIM 4.12), for example the plateauing effect observed at high absorbance values in UV/VIS spectroscopy.. Figure 7 illustrates the relationship between some of the key terms related to ‘**measuring interval**’. The linear interval (often referred to as the ‘linear range’) is the set of measured quantity values for which linearity of a **measuring system** applies. The LOD is below the LOQ. The measuring interval should be compatible with the analytical requirement and, therefore, fit for the purpose. If, for example, the analyte level in samples is expected to be well above the LOQ, the laboratory may not need to cover the entire interval illustrated in Figure 7.

Many methods rely on the test sample received in the laboratory being processed (digested, extracted, diluted, for example) before it can be presented to the **measuring instrument** and a signal recorded. In such cases there are two **measuring intervals** to consider – the instrument **measuring interval** (described in the VIM definition) and the **measuring interval** for the **measurement procedure** as a whole (including any sample preparation steps). The evaluation of these different **measuring intervals** is discussed in detail in the Eurachem guide [41].

Die **Empfindlichkeit eines Messsystems** ist, im Falle linearer Abhängigkeit, durch die Steigung der **Kalibrierkurve** (VIM 4.31) gegeben.

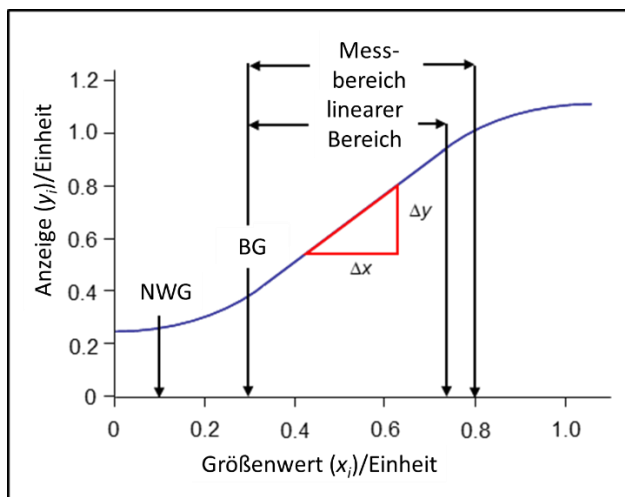


Abbildung 7 Ein Kalibrierdiagramm mit Anzeigen (y_i) gegen Größenwerte (x_i) mit Angabe des Messbereichs, des linearen Bereichs, der BG und der NWG. Das Dreieck beschreibt die Berechnung der Empfindlichkeit oder der Steigung der Kalibrierkurve. ($\Delta y/\Delta x$)

The **sensitivity of a measuring system** is, in the case of linear dependence, given by the slope of the **calibration curve** (VIM 4.31).

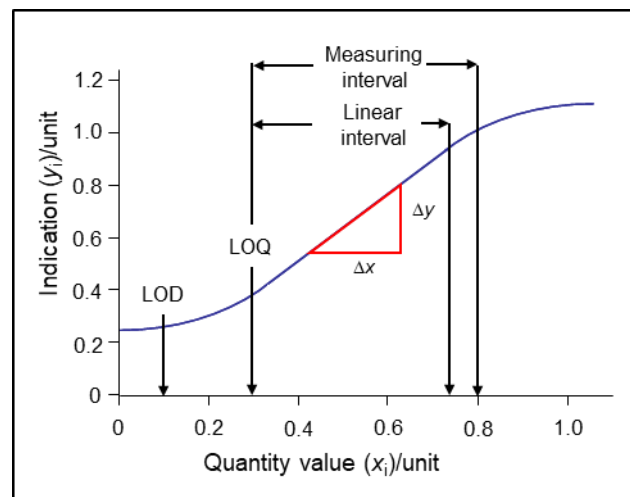


Figure 7 A calibration diagram showing indications (y_i) versus quantity values (x_i) where the measuring interval, linear interval, LOQ and LOD are identified. The triangle illustrates the calculation of the sensitivity or the slope of the calibration curve ($\Delta y/\Delta x$)

4.4 Nachweisgrenze

Messwert, den man mittels eines vorgegebenen **Messverfahrens** erhält, für das die Wahrscheinlichkeit, fälschlich das Fehlen einer Komponente in einem Material anzugeben, β ist, bei einer Wahrscheinlichkeit von α , ihre Anwesenheit fälschlicherweise anzugeben (VIM 4.18)

Der VIM definiert die Nachweisgrenze hinsichtlich einer **Messgröße**.

Dies ist nicht konsistent mit der IUPAC- und anderen Definitionen, die zurzeit in der analytischen Chemie verwendet werden und sich auf den **wahren Wert einer Größe** (VIM 2.11) und nicht auf einen **Messwert** beziehen. Es ist nicht klar, ob die Differenz beabsichtigt ist und, wenn dem so ist, wie die Implementierung der VIM-Definition erfolgen kann. Die unten stehende Beschreibung folgt daher den Empfehlungen der IUPAC für die Beschreibung der Nachweisfähigkeit einer analytischen Methode [43]. Viele Analytiker sind vertraut mit der Berechnung der **Nachweisgrenze** (NWG) für ein **Messverfahren** durch Multiplikation einer Standardabweichung s (erhalten aus den Ergebnissen der Analytik von Leerproben oder einer Probe, die eine geringes Niveau des Analyten enthält) mit einem geeigneten Faktor (typischerweise zwischen 3 und 5). Der Faktor ist statistisch begründet. Der folgende Text erklärt den Hintergrund des gewöhnlich verwendeten Faktors 3.

4.4 Detection limit

measured quantity value, obtained by a given **measurement procedure**, for which the probability of falsely claiming the absence of a component in a material is β , given a probability α of falsely claiming its presence (VIM 4.18)

VIM defines the **detection limit** in terms of a **measured quantity value**.

This is not consistent with the IUPAC (and other) definitions currently used in analytical chemistry which refer to a **true quantity value** (VIM 2.11) rather than a **measured value**. It is not clear whether the difference is intentional and, if so, how the VIM definition can be implemented. The description below therefore follows recommendations made by IUPAC for establishing detection capability for analytical methods [43]. Many analysts will be familiar with calculating the **limit of detection** (LOD) for a **measurement procedure** by multiplying a standard deviation, s (obtained from the results of the analysis of a blank sample or a sample containing a low level of the analyte) by an appropriate factor (typically between 3 and 5). The multiplying factor is based on statistical reasoning. The following text explains the background to the commonly used factor of 3.

Die Diskussion befasst sich mit der NWG hinsichtlich von Konzentrationen, aber gilt genauso für andere **Größen**, z.B. Massenanteilen. Das Ziel der Bestimmung der NWG ist typischerweise, die kleinste Konzentration des Analyten in der Probe festzustellen, die mit einem gegebenen **Messverfahren** und einem spezifizierten Vertrauensgrad nachgewiesen werden kann. Die Definition der NWG ist ein 2-Stufen-Prozess. Zunächst wird ein ‚kritischer Wert‘ ermittelt. Dieser Wert wird so festgesetzt, dass die Wahrscheinlichkeit, ein **Messergebnis** zu erhalten, das größer ist als der kritische Wert nicht größer ist als α , wenn die Probe tatsächlich *keinen* Analyten enthält. Der kritische Wert ist das Kriterium, eine Probe für ‚positiv‘ zu erklären. Üblicherweise wird eine Falsch-positiv-Wahrscheinlichkeit $\alpha = 0,05$ verwendet; dies führt zu einem kritischen Wert von ungefähr $1,65s$ (wobei s die Standardabweichung einer großen Anzahl von Ergebnissen für ein Leerprobe oder für eine Probe ist, die nur eine geringe Konzentration an Analyt enthält und $1,65$ ist der einseitige Student t -Wert für unendlich viele Freiheitsgrade auf einem Signifikanzniveau $\alpha = 0,05$). Der kritische Wert ist auf der senkrechten Achse in Abbildung 8 eingezeichnet, um hervorzuheben, dass er ein **Messwert** ist. Der kritische Wert wird bequemerweise als Konzentration ausgedrückt, obwohl er prinzipiell jegliche Beobachtung, wie z.B. eine Peakfläche sein kann. Jedes Ergebnis, das den kritischen Wert übersteigt, sollte als Hinweis auf einen Analytgehalt gewertet werden, der sich signifikant von Null unterscheidet.

Wenn jedoch der **wahre Wert** der Konzentration in einer Probe exakt gleich dem kritischen Wert (ausgedrückt als Konzentration) wäre, würde erwartet werden, dass ungefähr die Hälfte der **Messergebnisse** unterhalb des kritischen Werts liegen; damit wäre die Quote der falsch negativen Werte bei 50 %. Dies wird durch die Verteilung mit der punktierten Linie in Abbildung 8 gezeigt. Eine falsch-negativ-Quote von 50 % ist offensichtlich zu groß für einen praktischen Nutzen; die Methode zeigt nicht zuverlässig Werte oberhalb des kritischen Werts an, wenn der **wahre Wert** der Konzentration gleich dem kritischen Wert ist. Die NWG (auch ‚minimaler nachweisbarer Wert‘ genannt) soll die wahre Konzentration wiedergeben, bei der die Rate falsch negativer Befunde bei einem gegebenen kritischen Wert akzeptabel ist. Der falsch-negative Fehler, β , wird, hauptsächlich aus historischen Gründen, gewöhnlich gleich dem falsch-positiv-Fehler gesetzt (IUPAC empfiehlt als üblichen Wert $\alpha = \beta = 0,05$). Mit $\alpha = \beta = 0,05$ liegt daher die NWG $1,65s$ oberhalb des kritischen Werts. Dies wird in Abbildung 8 durch die schraffierte Verteilung auf der horizontalen Achse dargestellt. Der Faktor zur Berechnung der NWG mit $\alpha = \beta = 0,05$ ist damit $1,65+1,65 = 3,30$, häufig gerundet zu $3,0$. Dies basiert auf einigen Näherungen, die in [43] beschrieben sind.

The discussion deals with LOD in terms of concentration but it applies equally to other quantities, e.g. mass fraction. The aim when determining the LOD is typically to establish the lowest concentration of the analyte present in a sample that can be detected, using a given measurement procedure, with a specified level of confidence. Defining the LOD is a two step process. First a ‘critical value’ is established. This value is set so that the probability of obtaining a measurement result that exceeds the critical value is no greater than α , if a sample actually contains none of the analyte. The critical value sets a criterion for declaring a sample to be ‘positive’. A false positive probability of $\alpha = 0.05$ is generally used; this leads to a critical value of approximately $1.65s$ (where s is the standard deviation of a large number of results for a blank sample or a sample containing a low concentration of the analyte, and 1.65 is the one-tailed Student t -value for infinite degrees of freedom at a significance level, $\alpha = 0.05$). The critical value is indicated on the vertical axis in Figure 8 to emphasise the fact that it is a **measured value**. The critical value is most conveniently expressed in terms of concentration, though in principle it may be any observation, such as peak area. Any result exceeding the critical value should be considered as indicating an analyte level that is significantly different from zero.

However, if the **true value** for the concentration in a sample were exactly equal to the critical value (expressed in terms of concentration), approximately half of the **measurement results** would be expected to fall below the critical value, giving a false negative rate of 50%. This is illustrated by the distribution shown with the dotted line in Figure 8. A false negative rate of 50% is obviously too high to be of practical use; the method does not reliably give results above the critical value if the **true value** for the concentration is equal to the critical value. The LOD (also known as ‘minimum detectable value’) is intended to represent the true concentration for which the false negative rate is acceptable given the critical value. The false negative error, β , is usually set equal to the false positive error, largely for historical reasons (IUPAC recommends default values of $\alpha = \beta = 0.05$). Using $\alpha = \beta = 0.05$, the LOD is therefore located $1.65s$ above the value specified for the critical value. This is illustrated by the shaded distribution on the horizontal axis in Figure 8. The factor for calculating the LOD with $\alpha = \beta = 0.05$ is thus $1.65+1.65 = 3.30$, which is frequently rounded to 3.0 . This is based on several approximations which are described in the literature [43].

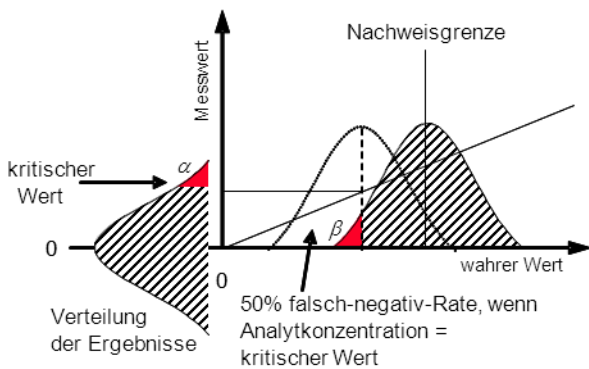


Abbildung 8 Darstellung der statistischen Basis zur Berechnung der Nachweisgrenze.

Anm. des Übersetzers: In der in Deutschland sehr gebräuchlichen DIN 32645 wird der Konzentrationswert, der dem kritischen Wert zugeordnet ist, als Nachweisgrenze definiert.

4.5 Messrichtigkeit

Ausmaß der Annäherung des Mittelwerts einer unendlichen Anzahl wiederholter **Messwerte** an einen **Referenzwert** (VIM 2.14)

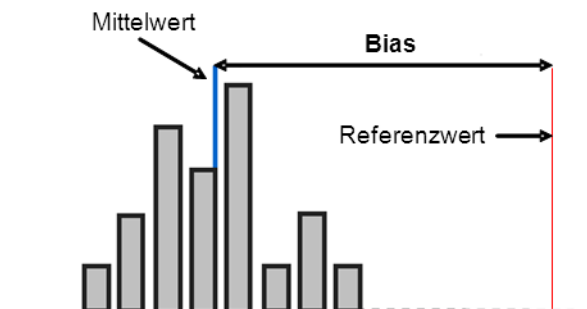


Abbildung 10 Schematische Darstellung der Abschätzung des Bias einer Messung. Der Mittelwert einiger Messergebnisse wird mit einem Referenzwert verglichen (die Unsicherheit des Referenzwerts ist nicht abgebildet).

Die **Messrichtigkeit** drückt die hypothetische Fähigkeit eines **Messverfahrens** aus, Ergebnisse nahe dem erwarteten **Referenzwert**, wie dem Wert eines **zertifizierten Referenzmaterials (ZRM)** (VIM 5.14), zu erzeugen. Die **Richtigkeit** ist ein qualitatives Konzept und kann daher nicht numerisch ausgedrückt werden. Die **Richtigkeit** steht jedoch in umgekehrtem Zusammenhang zur **systematischen Messabweichung** (VIM 2.17), die als **Bias der Messung** (VIM 2.18) abgeschätzt werden kann. Ein Beispiel für die Abschätzung des Bias als Differenz zwischen dem Mittelwert einiger **Messergebnisse** und einem **Referenzwert** ist in Abbildung 9 dargestellt. Der **Bias** kann auch als das Verhältnis zwischen **gemessenen** und **Referenzwerten** angegeben werden.

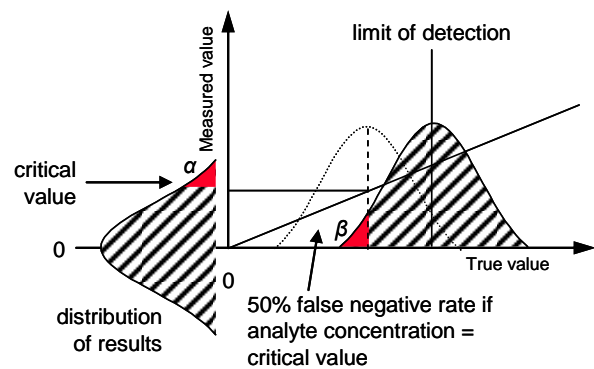


Figure 8 Illustration of the statistical basis for detection limit calculations.

4.5 Measurement trueness

closeness of agreement between the average of an infinite number of replicate **measured quantity values** and a **reference quantity value** (VIM 2.14)

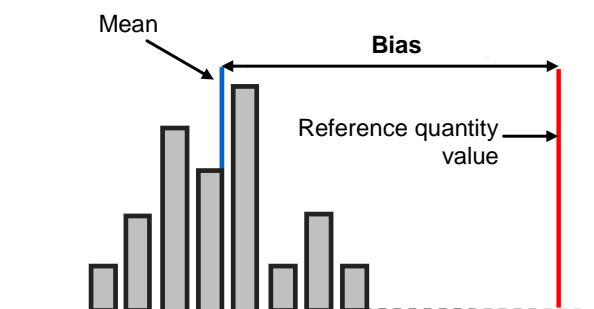


Figure 9 Schematic illustration of the estimation of measurement bias. The mean of several measurement results is compared with a reference quantity value (note that the uncertainty in the reference value is not shown).

Measurement trueness expresses the hypothetical ability of a **measurement procedure** to yield results close to expected **reference quantity values**, such as the value of a **CRM** (VIM 5.14). **Trueness** is a qualitative concept and therefore cannot be expressed numerically. However, **trueness** is inversely related to **systematic measurement error** (VIM 2.17) which may be estimated as **measurement bias** (VIM 2.18). An example of the estimation of bias as the difference between the mean value of several **measurement results** and a **reference quantity value** is shown in Figure 9. **Bias** can also be reported as the ratio of **measured** and **reference quantity values**.

Ein **Bias einer Messung** kann beispielsweise auf eine ungeeignete **Kalibrierung** oder mangelnde **Selektivität** (siehe Abschnitt 4.2) zurückzuführen sein. Wo dies angemessen ist, kann der Effekt bekannter **systematischer Messabweichungen von Messergebnissen** durch Einführen einer **Korrektur** (VIM 2.53), die auf dem geschätzten **Bias** basiert, entfernt werden. Zum Beispiel kann die Anzeige eines Digitalthermometers korrigiert werden auf der Basis eines **Bias**, der bei der **Kalibrierung** beobachtet wurde. Jeder Faktor jedoch, der für eine **Korrektur** verwendet wird, hat auch eine zugehörige **Unsicherheit**.

Einen Schätzwert für den **Bias** von **Messergebnissen** eines Labors kann man durch mehrfache Messung des **Größenwerts** eines oder mehrerer **RM** (VIM 5.13) unter **Wiederholbedingungen** (VIM 2.20) oder unter **Vergleichbedingungen** (VIM 2.22) und Berechnung des Mittelwerts erhalten. Das ideale RM ist ein ZRM mit Eigenschaftswerten, die denen der interessierenden Proben nahekommen. Der Schätzwert für den **Bias** ist dann die Differenz zwischen dem erhaltenen Mittelwert und dem **Referenzwert**. Es ist zu beachten, dass der **Bias-Wert** wegen der Unsicherheiten des Mittelwerts und des **Referenzwertes** ebenfalls eine **Messunsicherheit** hat.

Beispiel: Der Mittelwert des Massenanteils von CaO in einem Zement-ZRM, der aus 10 **Messergebnissen** aus den letzten 6 Monaten mit XRF erhalten wurde, ist 63,53 % mit einer Standardabweichung des Mittelwerts von 0,1 %. Der zertifizierte **Größenwert** ist 63,23 % mit einer **erweiterten Unsicherheit** (VIM 2.35) von 0,21 % ($k=2$). Der **Bias der Messung**, bestimmt mit diesem ZRM unter **Vergleichbedingungen** wird daher abgeschätzt zu $63,53 - 63,23 = 0,3$ %. Der **Bias** kann auch als relativer Wert (in Prozent) ausgedrückt werden, d.h. $100 \times 0,3/63,23 = 0,47$ %.

4.6 Messpräzision

Ausmaß der Übereinstimmung von **Anzeigen** oder **Messwerten**, die durch wiederholte **Messungen** an denselben oder ähnlichen Objekten unter vorgegebenen Bedingungen erhalten wurden (VIM 2.15)

Die **Messpräzision** ist verwandt mit der **zufälligen Messabweichung** (VIM 2.19) und ist ein Maß dafür, wie nahe Ergebnisse beieinander liegen.

Messergebnisse können nicht so korrigiert werden, dass der Effekt der **zufälligen Abweichung** entfernt wird, aber die Größe der **zufälligen Abweichung** kann reduziert werden, indem man wiederholte **Messungen** macht und den Mittelwert berechnet.

A **measurement bias** may be due, for example, to inappropriate **calibration** or to lack of **selectivity** (see section 4.2). Where appropriate, the effect of known **systematic errors on measurement results** can be removed by introducing a **correction** (VIM 2.53) based on the estimated **bias**. For example, the reading of a digital thermometer can be corrected on the basis of the **bias** observed during **calibration**. However, any factor used to make a **correction** will also have an associated **uncertainty**.

An estimate of the **bias** in **measurement results** produced by a laboratory can be obtained by measuring the **quantity value** of one or more **RMs** (VIM 5.13) several times under **repeatability conditions** (VIM 2.20) or under **intermediate precision conditions** (VIM 2.22), and calculating the mean value. The ideal **RM** is a **CRM** with property values close to those of the test samples of interest. The estimate of **bias** is then the difference between the mean value obtained and the **reference quantity value**. Note that there will be a **measurement uncertainty** associated with the bias value due to the uncertainties in the mean value and in the **reference quantity value**.

Example: The mean value of the mass fraction of CaO in a cement **CRM** calculated from 10 **measurement results** obtained over a six month period using XRF is 63.53% with a standard deviation of the mean of 0.1%. The certified **quantity value** is 63.23% with an **expanded uncertainty** (VIM 2.35) of 0.21% ($k=2$). The **measurement bias** determined under **intermediate precision conditions** using this **CRM** is therefore estimated as $63.53 - 63.23 = 0.3\%$. The **bias** can also be expressed as a relative value (percent), i.e. $100 \times 0.3/63.23 = 0.47\%$.

4.6 Measurement precision

closeness of agreement between **indications** or **measured quantity values** obtained by replicate **measurements** on the same or similar objects under specified conditions (VIM 2.15)

Measurement precision is related to **random measurement error** (VIM 2.19) and is a measure of how close results are to one another.

Measurement results cannot be corrected to remove the effect of **random error** but the size of the **random error** can be reduced by making replicate **measurements** and calculating the mean value.

Die **Messpräzision** wird numerisch über das Maß der *Unpräzision* ausgedrückt, wie z.B. die Standardabweichung, berechnet aus den Ergebnissen wiederholter **Messungen**, die unter bestimmten Bedingungen ausgeführt wurden. VIM 3 definiert drei Typen von Messbedingungen: **Wiederholbedingung** (VIM 2.20), **Vergleichbedingung** (VIM 2.22) und **erweiterte Vergleichbedingung** (VIM 2.24).

Anm. d. Übers.: Im Deutschen wird häufig, abweichend von der Übersetzung des VIM 3, für die „Vergleichbedingung“ auch Zwischenbedingung und für die „erweiterte Vergleichbedingung“ nur Vergleichbedingung verwendet.

Schätzwerte für die **Wiederholpräzision** (VIM 2.21) und die **Vergleichpräzision** (VIM 2.23) werden in einem einzelnen Labor erhalten. **Wiederholbedingungen von Messungen** bezieht sich auf **Messungen**, die an Anteilen von Proben desselben Materials durch einen einzelnen Analytiker, mit demselben Verfahren, unter denselben Betriebsbedingungen, innerhalb einer kurzen Zeitspanne gemacht werden. Die **Wiederholpräzision** wird oft benutzt, um einen Schätzwert für die Variabilität der Ergebnisse innerhalb einer Serie (auch als „innerhalb einer Charge“ oder „innerhalb eines Assays“ bezeichnet) zu erhalten. Unter **Vergleich(Zwischen-)bedingungen** werden **Messungen** an Anteilen desselben Materials mit demselben Verfahren, aber über einen längeren Zeitraum und, wenn möglich, von verschiedenen Analytikern, die unterschiedliche Geräte, verschiedene Chargen von Reagenzien etc., verwenden, gemacht. Die **Vergleich(Zwischen-)präzision** wird häufig als Schätzwert für die Variabilität zwischen Serien verwendet. **Vergleich(Zwischen-)bedingungen** sind benutzerdefiniert und die verwendeten Bedingungen sollten immer aufgezeichnet werden (es ist zu beachten, dass manche Laboratorien die Bezeichnung Reproduzierbarkeit innerhalb des Labors für die **Vergleich(Zwischen-)präzision** verwenden).

Da die **Wiederholbarkeit** nur die Variation der Ergebnisse über einen kurzen Zeitraum widerspiegelt, wird hierdurch vermutlich die Variabilität der Ergebnisse unterschätzt, wenn das **Messverfahren** routinemäßig verwendet wird. Angenommen, es wurden angemessene **Vergleich(Zwischen-)präzisionsbedingungen** während der **Validierung** gewählt, dann liefert die **Vergleich(Zwischen-)präzision** einen realistischeren Schätzwert für die Langzeitvariabilität der **Messergebnisse** im Labor.

Schätzwerte für die **(erweiterte) Vergleichpräzision** (VIM 2.25) erhält man aus **Messergebnissen**, die an verschiedenen Orten erhalten wurden. **(Erweiterte) Vergleichbedingungen** beziehen sich auf **Messungen** an Anteilen desselben Materials durch verschiedene Analytiker an verschiedenen Orten. In ‚gemeinschaftlichen‘ (engl. collaborative) Verfahrensvalidierungsstudien (*Anm. d. Übers.: Validierungsringversuchen*) wird dasselbe **Messverfahren** von allen teilnehmenden Laboratorien verwendet.

Measurement precision is expressed numerically using measures of *imprecision* such as the standard deviation calculated from results obtained by carrying out replicate **measurements** on a suitable material under specified conditions. VIM 3 defines three types of **measurement condition**: **repeatability condition** (VIM 2.20), **intermediate precision condition** (VIM 2.22) and **reproducibility condition** (VIM 2.24).

Estimates of **measurement repeatability** (VIM 2.21) and **intermediate measurement precision** (VIM 2.23) are obtained in a single laboratory. **Repeatability condition of measurement** refers to **measurements** being made on portions of the same material by a single analyst, using the same procedure, under the same operating conditions over a short time period. **Measurement repeatability** is often used to provide an estimate of within-run (also known as within-batch or intra-assay) variability in results. Under **intermediate conditions**, **measurements** are made on portions of the same material using the same procedure, but over an extended time period and, where possible, by different analysts using different pieces of equipment, different batches of reagents, etc. **Intermediate measurement precision** is often used to provide an estimate of between-batch variability. **Intermediate precision** is user-defined and the conditions used should always be recorded (note that some laboratories use the term within-laboratory reproducibility for **intermediate measurement precision**).

Since **measurement repeatability** only reflects the variation in results over a short time period it is likely to underestimate the variability in results obtained when the **measurement procedure** is used routinely. Assuming appropriate **intermediate precision conditions** have been used during the **validation** study, the **intermediate measurement precision** provides a more realistic estimate of the long-term variability of **measurement results** in the laboratory.

Estimates of **measurement reproducibility** (VIM 2.25) are obtained from **measurement results** produced in different locations. **Reproducibility conditions of measurement** refer to **measurements** being made on portions of the same material by different analysts working in different locations. In ‘collaborative’ method validation studies the same **measurement procedure** is used at all the participating laboratories.

Die Bezeichnung ‚(erweiterte) Vergleichbedingung‘ wird aber in VIM 3 auch für Situationen verwendet, bei denen verschiedene **Messverfahren** für dieselbe **Messgröße** verwendet werden können (VIM 2.24, Anm. 1), z.B. in einem System von Eignungstestingversuchen. Es ist zu beachten, dass andere Normen wie ISO 3534-2 [44] und ISO 5725-1 [45] den Begriff „Vergleichbarkeit“ speziell für den Fall von Laborvergleichen mit einem einzigen Messverfahren verwenden. Deshalb ist es essenziell, die Bedingungen zu spezifizieren, unter denen die **erweiterte Vergleichbarkeit** ermittelt wurde.

Abbildung 10 veranschaulicht die Beziehung zwischen **Wiederholpräzision**, **Vergleich(Zwischen-)präzision** und **(erweiterter) Vergleichpräzision**. Sie zeigt schematisch den zu erwartenden Anstieg der Streuung bei zunehmender Variation der Messbedingungen. In der Abbildung bezieht sich ‚zwischen Injektionen‘ auf die Wiederholung nur des Endmessschrittes eines vielstufigen **Messverfahrens** (z.B. wiederholte Injektionen von Anteilen einer Testlösung in einen Gaschromatographen). Die Wiederholung dieser Aktion würde die **Wiederholpräzision** des Endmessschrittes liefern, würde aber die Effekte **zufälliger Abweichungen** bei jedweder Probenvorbereitung oder bei Clean-up-Schritten ausschließen. ‚Wiederholungen innerhalb der Serie‘ repräsentieren die Wiederholung des gesamten **Messverfahrens** unter **Wiederholbedingungen**.

So wie die Bedingungen variabler werden (z.B. von der Wiederholung nur eines Teils des **Messverfahrens** (‚zwischen Injektionen‘) zur Wiederholung des gesamten **Messverfahrens** unter **Wiederhol-, Vergleich(Zwischen-) oder (erweiterte) Vergleichbedingungen**) wird die Unpräzision der **Messergebnisse** im Allgemeinen größer.

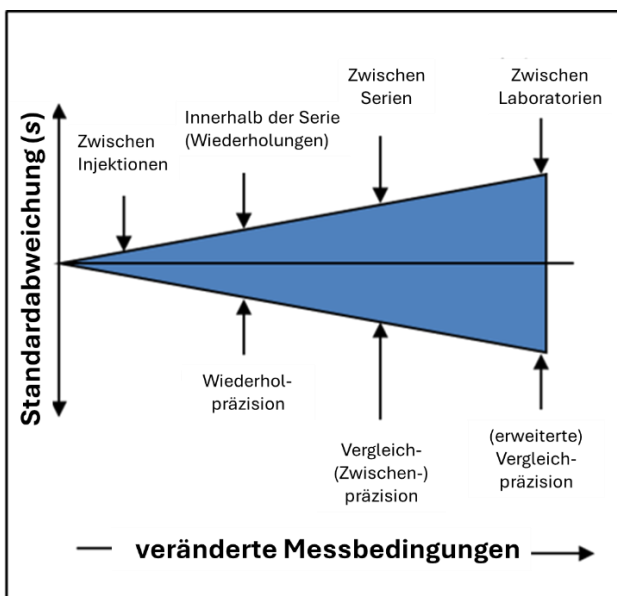


Abbildung 10 Schematische Darstellung der erwarteten Beziehung zwischen Präzisionsschätzungen, die unter verschiedenen Messbedingungen erhalten werden, dargestellt als Quantität der beobachteten Standardabweichung.

However, in VIM 3 the term ‘reproducibility conditions’ also applies to situations where different **measurement procedures** may be used for the same **measurand** (VIM 2.24, Note 1), for example in a proficiency testing scheme. Note that other Standards such as ISO 3534-2 [44] and ISO 5725-1 [45] use the term ‘reproducibility’ specifically for the interlaboratory case involving a single measurement procedure. Therefore, it is essential that the conditions under which **reproducibility** is evaluated are specified.

Figure 10 illustrates the relationship between **measurement repeatability**, **intermediate measurement precision** and **measurement reproducibility**. It shows, schematically, the expected increase in dispersion as the variation in **measurement conditions** increases. In the figure, ‘between-injections’ refers to replication of only the end measurement step of a multistage **measurement procedure** (e.g. repeat injections of portions of a test solution onto a gas chromatograph). Replicating this action would give the **measurement repeatability** of the final measurement stage, but would exclude the effect of **random errors** associated with any sample pre-treatment or clean-up steps. ‘Within-run (replicates)’ represents replication of the whole **measurement procedure** under **repeatability conditions**.

As the conditions of **measurement** become more variable (e.g. moving from replicating only part of the **measurement procedure** (‘between-injections’) to replicating the entire **measurement procedure** under **repeatability, intermediate precision or reproducibility conditions**) the observed imprecision of **measurement results** generally increases.

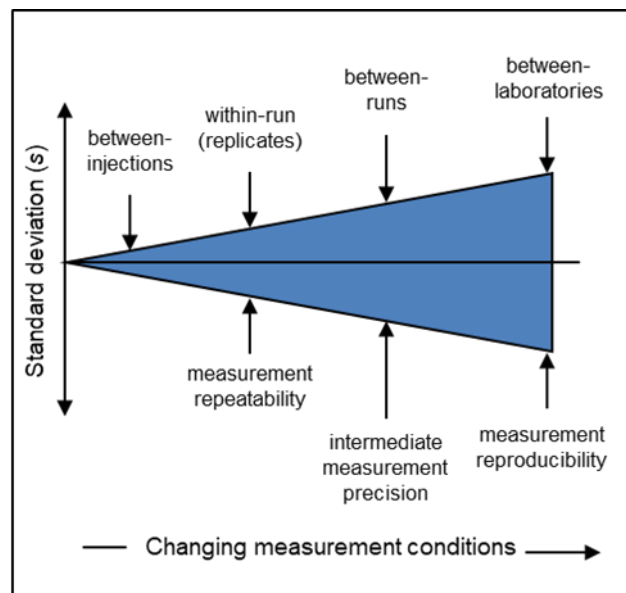


Figure 10 Schematic representation of the expected relationship between precision estimates obtained under different measurement conditions, shown in terms of the magnitude of the observed standard deviation.

4.7 Messgenauigkeit

Ausmaß der Annäherung eines **Messwerts** an einen **wahren Wert** einer **Messgröße** (VIM 2.13)

Die **Messgenauigkeit** beschreibt, wie nahe ein *einzelnes Messergebnis* dem **wahren Wert der Größe** (VIM 2.11) ist. **Genauigkeit** wird daher sowohl durch zufällige als auch durch systematische Einflüsse auf das **Messergebnis** beeinflusst. **Genauigkeit** kann nicht als numerischer Wert angegeben werden, aber **Messergebnisse** werden ‚genauer‘ genannt, wenn die **Messabweichungen** und damit die **Messunsicherheiten** reduziert werden. Abbildung 11 veranschaulicht dieses Konzept am Beispiel des Schießens auf eine Zielscheibe.

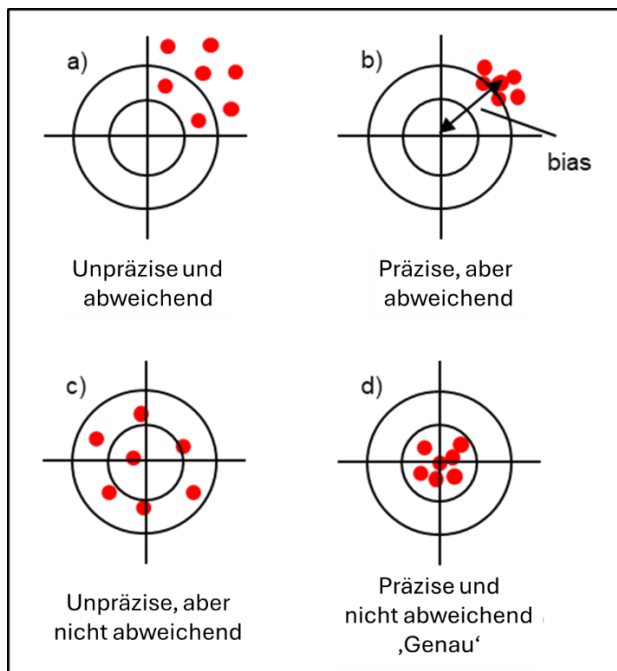


Abbildung 12 Bildliche Darstellung von Präzision, Bias und Genauigkeit

Die „Treffer“ auf der Zielscheibe stellen einzelne **Messergebnisse** dar; der **Referenzwert** ist der Mittelpunkt der Zielscheibe. Die beste **Genauigkeit** (die in der Regel der geringsten **Messunsicherheit** entspricht) wird in Fall d) erreicht, wo alle Einzelergebnisse nahe am **Referenzwert** liegen. In den Fällen c) und d) gibt es keinen signifikanten **Bias**, da alle Ergebnisse im Mittelpunkt der Zielscheibe liegen. Die **Präzision** ist jedoch in Fall c) schlechter, da die Ergebnisse weiter gestreut sind. Die **Präzision** in Fall b) ist ähnlich wie in Fall d), aber in Fall b) gibt es einen signifikanten **Bias**, da alle Ergebnisse vom Mittelpunkt im gleichen Bereich der Zielscheibe versetzt sind. Die **Genauigkeit** ist in Fall a) am schlechtesten, da die Ergebnisse weit verstreut und nach rechts von der Zielscheibe versetzt sind.

4.7 Measurement accuracy

closeness of agreement between a **measured quantity value** and a **true quantity value** of a **measurand** (VIM 2.13)

Measurement accuracy describes how close a *single measurement result* is to the **true quantity value** (VIM 2.11). **Accuracy**, therefore, is influenced by both the random and systematic effects on the **measurement result**. **Accuracy** cannot be given a numerical value but **measurement results** are said to be ‘more accurate’ when the **measurement errors**, and therefore the **measurement uncertainty**, are reduced. Figure 11 illustrates this concept, using the example of shooting at a target.

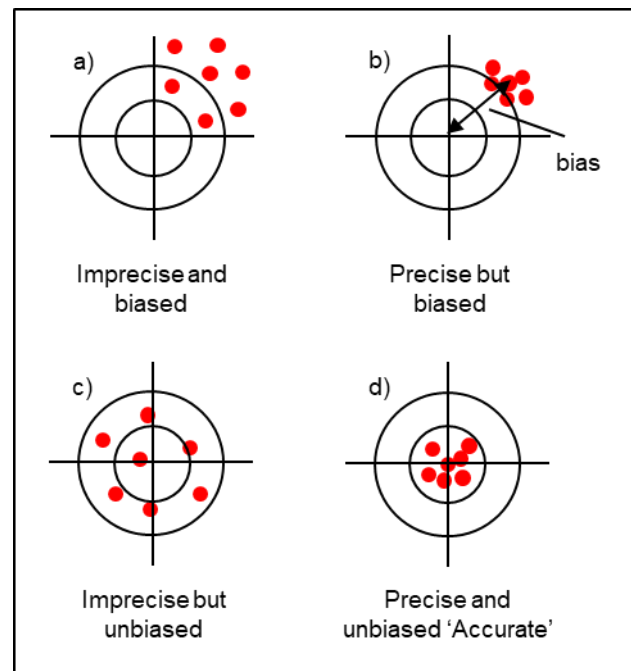


Figure 12 Figurative representation of precision, bias and accuracy

The ‘shots’ on the target represent individual **measurement results**; the **reference quantity value** is the centre of the target. The best **accuracy** (usually corresponding to the lowest **measurement uncertainty**) is achieved in case d) where the individual results are all close to the **reference value**. In cases c) and d) there is no significant **bias** as the results are all clustered in the centre of the target. However, the **precision** is poorer in case c) as the results are more widely scattered. The **precision** in case b) is similar to that in case d), but there is a significant **bias** in case b) as all the results are off-set from the centre in the same area of the target. The **accuracy** is poorest in case a) as the results are widely scattered and are off-set to the right of the target.

Da die **Messgenauigkeit** (wie in VIM 3 definiert) ein qualitatives Konzept ist, kann sie nicht dazu verwendet werden, um einen quantitativen Hinweis auf die Zuverlässigkeit von **Messergebnissen** zu geben. Hier ist eine Schätzung der **Messunsicherheit** erforderlich (siehe Kapitel 3).

Because **measurement accuracy** (as defined in VIM 3) is a qualitative concept, it cannot be used to give a quantitative indication of the reliability of **measurement results**. Here an estimate of **measurement uncertainty** is required (see chapter 3).

Anhang

Tabelle A 1 In diesem Leitfaden behandelte Begriffe, Synonyme und ihre Fundstelle im VIM 3. Der fett gedruckte Begriff ist der bevorzugte. Die VIM Fundstelle ist fett gedruckt für Begriffe, deren vollständige Definition in diesem Leitfaden aufgeführt ist.

Begriff	Synonym	VIM 3 Fundstelle
abgeleitete Größe		1.5
abgeleitete Einheit		1.11
Anzeige		4.1
anzeigendes Messinstrument	Messgerät mit direkter Ausgabe	3.3
Austauschbarkeit eines Referenzmaterials		5.15
Basisgröße		1.4
Basiseinheit		1.10
Bezugsnormal		5.6
Bias der Messung		2.18
Einganggröße des Modells der Messung	Einganggröße	2.50
Einheitensystem		1.13
Empfindlichkeit		4.12
Ermittlungsmethode A der Messunsicherheit		2.28
Ermittlungsmethode B der Messunsicherheit		2.29
erweiterte Messunsicherheit	Erweiterte Unsicherheit	2.35
(erweiterte) Vergleichbedingung		2.24
(erweiterte) Vergleichpräzision		2.25
Erweiterungsfaktor		2.38
Eigenunsicherheit		2.27
Gebrauchsnormal		5.7
Größe		1.1
Größenart	Art einer Größe	1.2
Größensystem		1.3
Größenwert		1.19
Hintergrundanzeige		4.2
Höchstwert der Messunsicherheit	Zielmessunsicherheit	2.34
Internationales Einheitensystem	SI	1.16
Internationales Größensystem	ISQ	1.6
Internationales Normal		5.2
intrinsisches Normal		5.10
Kalibrierdiagramm		4.30

Begriff	Synonym	VIM 3 Fundstelle
Kalibrierhierarchie		2.40
Kalibrierkurve		4.31
Kalibriernormal		5.12
Kalibrierung		2.39
kombinierte Standardmessunsicherheit	Kombinierte Standardunsicherheit	2.31
Korrektion		2.53
Maßeinheit	Einheit im Messwesen, Einheit	1.9
Maßverkörperung		3.6
Messabweichung	Abweichung	2.16
Messbereich		4.7
Messergebnis		2.9
Messgenauigkeit	Genauigkeit	2.13
Messgerät		3.1
Messgerätedrift		4.21
Messgröße		2.3
Messmethode		2.5
Messpräzision	Präzision	2.15
Messprinzip		2.4
Messrichtigkeit	Richtigkeit	2.14
Messsystem		3.2
Messung		2.1
Messunsicherheit	Unsicherheit	2.26
Messunsicherheitsbilanz		2.33
Messverfahren		2.6
Messwert		2.10
Metrologie		2.2
metrologische Rückführbarkeit	messtechnische Rückführbarkeit	2.41
metrologische Rückführbarkeit auf eine Einheit	messtechnische Rückführbarkeit auf eine Einheit	2.43
metrologische Rückführungskette	messtechnische Rückführungskette	2.42
metrologische Vergleichbarkeit von Messergebnissen	metrologische Vergleichbarkeit	2.46
metrologische Verträglichkeit von Messergebnissen	metrologische Verträglichkeit	2.47
Modell der Messung		2.48
Nachweisgrenze		4.18
nationales Normal		5.3
Nennwert		4.6
Nominalmerkmal		1.30

Begriff	Synonym	VIM 3 Fundstelle
Normal	Etalon	5.1
Primärnormal		5.4
Primärmessverfahren		2.8
Referenzmaterial	RM	5.13
Referenzmessverfahren		2.7
Referenzwert		5.18
Reisenormal		5.8
relative Standardmessunsicherheit	relative Standardunsicherheit	2.32
Sekundärnormal		5.5
Selektivität		4.13
Standardmessunsicherheit	Standardunsicherheit	2.30
systematische Messabweichung	systematische Abweichung	2.17
Validierung		2.45
Vergleich-(Zwischen-)bedingung		2.22
Vergleich-(Zwischen-)präzision		2.23
Verifizierung		2.44
visuell anzeigendes Messgerät		3.4
wahrer Wert einer Größe	wahrer Wert	2.11
Wiederholbedingung		2.20
Wiederholpräzision		2.21
zertifiziertes Referenzmaterial	ZRM	5.14
zufällige Messabweichung		2.19

Appendix

Table A 1 Concepts discussed in this Guide, synonyms and the VIM reference. Concept in bold is the preferred term. The VIM reference is shown in bold for concepts where the full definition is given in this Guide.

Concept	Synonym	VIM 3 Reference
base quantity		1.4
base unit		1.10
blank indication	background indication	4.2
calibration		2.39
calibration curve		4.31
calibration diagram		4.30
calibration hierarchy		2.40
calibrator		5.12
certified reference material	CRM	5.14
combined standard measurement uncertainty	combined standard uncertainty	2.31
commutability of a reference material		5.15
correction		2.53
coverage factor		2.38
definitional uncertainty		2.27
derived quantity		1.5
derived unit		1.11
detection limit	limit of detection	4.18
displaying measuring instrument		3.4
expanded measurement uncertainty	expanded uncertainty	2.35
indicating measuring instrument		3.3
indication		4.1
input quantity in a measurement model	input quantity	2.50
instrumental drift		4.21
intermediate measurement precision	intermediate precision	2.23
intermediate precision condition of measurement	intermediate precision condition	2.22
international measurement standard		5.2
International System of Quantities	ISQ	1.6
International System of Units	SI	1.16
intrinsic measurement standard	intrinsic standard	5.10
kind of quantity	kind	1.2
material measure		3.6

Concept	Synonym	VIM 3 Reference
measurand		2.3
measured quantity value	value of a measured quantity, measured value	2.10
measurement		2.1
measurement accuracy	accuracy of measurement, accuracy	2.13
measurement bias	bias	2.18
measurement error	error of measurement, error	2.16
measurement method	method of measurement	2.5
measurement model	model of measurement, model	2.48
measurement precision	precision	2.15
measurement principle	principle of measurement	2.4
measurement procedure		2.6
measurement repeatability	repeatability	2.21
measurement reproducibility	reproducibility	2.25
measurement result	result of measurement	2.9
measurement standard	etalon	5.1
measurement trueness	trueness of measurement, trueness	2.14
measurement uncertainty	uncertainty of measurement, uncertainty	2.26
measurement unit	unit of measurement, unit	1.9
measuring instrument		3.1
measuring interval	working interval	4.7
measuring system		3.2
metrological comparability of measurement results	metrological comparability	2.46
metrological compatibility of measurement results	metrological compatibility	2.47
metrological traceability		2.41
metrological traceability chain	traceability chain	2.42
metrological traceability to a measurement unit	metrological traceability to a unit	2.43
metrology		2.2
national measurement standard	national standard	5.3
nominal property		1.30
nominal quantity value	nominal value	4.6
primary reference measurement procedure	primary reference procedure	2.8
primary measurement standard	primary standard	5.4
quantity		1.1
quantity value	value of a quantity, value	1.19
random measurement error	random error of measurement, random error	2.19

Concept	Synonym	VIM 3 Reference
reference material	RM	5.13
reference measurement procedure		2.7
reference measurement standard	reference standard	5.6
reference quantity value	reference value	5.18
relative standard measurement uncertainty		2.32
repeatability condition of measurement	repeatability condition	2.20
reproducibility condition of measurement	reproducibility condition	2.24
secondary measurement standard	secondary standard	5.5
selectivity of a measuring system	selectivity	4.13
sensitivity of a measuring system	sensitivity	4.12
standard measurement uncertainty	standard uncertainty of measurement, standard uncertainty	2.30
system of quantities		1.3
system of units		1.13
systematic measurement error	systematic error of measurement, systematic error	2.17
target measurement uncertainty	target uncertainty	2.34
travelling measurement standard	travelling standard	5.8
true quantity value	true value of a quantity, true value	2.11
type A evaluation of measurement uncertainty	type A evaluation	2.28
type B evaluation of measurement uncertainty	type B evaluation	2.29
uncertainty budget		2.33
validation		2.45
verification		2.44
working measurement standard	working standard	5.7

Literatur / References

1. ISO/IEC Guide 99:2007, International vocabulary of metrology – Basic and general concepts and associated terms (VIM), ISO/IEC, Geneva (2007).
2. JCGM 200:2012, International vocabulary of metrology – Basic and general concepts and associated terms (VIM). Available from www.bipm.org.
3. VIM definitions with informative annotations. Available at <https://jcgmbipm.org/vim/en/index.html>.
4. ISO/IEC 17025:2017, General requirements for the competence of testing and calibration laboratories, ISO/IEC, Geneva (2017).
5. ISO 15189:2022, Medical laboratories – Requirements for quality and competence, ISO, Geneva (2022).
6. ISO/IEC 17043:2010, Conformity assessment – General requirements for proficiency testing, ISO/IEC, Geneva (2010).
7. ISO 17034:2016, General requirements for the competence of reference material producers, ISO, Geneva (2016).
8. ISO 9000:2015, Quality management systems – Fundamentals and vocabulary, ISO, Geneva (2015).
9. The International System of Units (SI), Bureau International des Poids et Mesures, (9th ed, 2019). Available from www.bipm.org.
10. International vocabulary of basic and general terms in metrology, 2nd Edition, ISBN 92-67-10175, ISO, Geneva (1993).
11. G. Nordin, R. Dybkaer, U. Forsum, X. Fuentes-Arderiu, F. Pontet, Vocabulary on nominal property, examination, and related concepts for clinical laboratory sciences (IFCC-IUPAC Recommendations 2017), *Pure Appl. Chem.*, **90**, 913-935 (2018). Available from www.degruyter.com/view/j/pac.
12. ISO 6508-1:2016, Metallic materials – Rockwell hardness test – Part 1: Test method, ISO, Geneva (2016).
13. ASTM E18-22, Standard Test Methods for Rockwell Hardness of Metallic Materials, ASTM International, West Conshohocken (2022).
14. S. Raut, S. Daniels, A. Heath, World Health Organization. Biologicals Unit & WHO Expert Committee on Biological Standardization, An international collaborative study to assign value to the 8th [eighth] WHO international standard for blood coagulation factor VIII concentrate (07/350), World Health Organization, Geneva (2009). Available from www.who.int/iris/handle/10665/70137.
15. Council Directive 80/181/EEC of 20 December 1979 on the approximation of the laws of the Member States relating to units of measurement and on the repeal of Directive 71/354/EEC, *Official Journal L* 039, 15/02/1980, p40-50.
16. R. Bettencourt da Silva and A. Williams (Eds.), *Eurachem/CITAC Guide: Setting and using target uncertainty in chemical measurement* (1st ed. 2015). ISBN: 978-989-98723-7-0 Available from www.eurachem.org.
17. M. Thompson, S. L. R. Ellison, A. Fajgelj, P. Willetts, R. Wood, Harmonised guidelines for the use of recovery information in analytical measurement (Technical Report), *Pure Appl. Chem.*, **71**, 337-348 (1999). Available from www.degruyter.com/view/j/pac.
18. EN 71-3:2019+A1:2021, Safety of toys – Part 3: Migration of certain elements, CEN, Brussels (2021).
19. Directive 98/79/EC of the European Parliament and of the Council of 27 October 1998 on in vitro diagnostic medical devices, *Official Journal L* 331, 07/12/1998, p1-37.
20. JCTLM Database of higher-order reference materials, measurement methods/procedures and services. Available at www.bipm.org/jctlm/.
21. S. S-C. Tai and M. J. Welch, Development and evaluation of a candidate reference method for the determination of total cortisol in human serum using ID-LC/MS and LC/MS/MS, *Anal. Chem.*, **76**, 1008-1014 (2004).
22. S. L. R. Ellison and A. Williams (Eds), *Eurachem/CITAC Guide: Metrological traceability in analytical measurement* (2nd ed. 2019). ISBN 978-0-948926-34-1. Available from www.eurachem.org.

23. P. De Bièvre, R. Dybkaer, A. Fajgelj, D. Brynn Hibbert, Metrological traceability of measurement results in chemistry: Concepts and implementation, (IUPAC Technical Report), *Pure Appl. Chem.*, **83**, 1873-1935 (2011). Available from www.degruyter.com/view/j/pac.
24. G. Schumann et al., IFCC primary reference procedures for the measurement of catalytic activity concentrations of enzymes at 37 °C. Part 9: Reference procedure for the measurement of catalytic concentration of alkaline phosphatase, *Clin. Chem. Lab. Med.*, **49**, 1439-1446 (2011).
25. ISO 17511:2020, In vitro diagnostic medical devices – Requirements for establishing metrological traceability of values assigned to calibrators, trueness control materials and human samples, ISO, Geneva (2020).
26. Certificate of analysis, ERM®- DA470k/IFCC, 2015, <https://crm.jrc.ec.europa.eu/>.
27. B. King, The selection and use of reference materials: A basic guide for laboratories and accreditation bodies, EEE/RM/062rev3 (2002). Available from www.eurachem.org.
28. ISO Guide 33:2015, Reference materials – Good practice in using reference materials, ISO, Geneva (2015).
29. W. G. Miller et al, IFCC Working Group Recommendations for Assessing Commutability Part 1: General Experimental Design, *Clin. Chem.*, **64**, 447-454 (2018). Available from <http://clinchem.aaccjnls.org/>.
30. G. Nilsson et al., IFCC Working Group Recommendations for Assessing Commutability Part 2: Using the Difference in Bias between a Reference Material and Clinical Samples, *Clin. Chem.*, **64**, 455-464 (2018). Available from <http://clinchem.aaccjnls.org/>.
31. J. R. Budd et al, IFCC Working Group Recommendations for Assessing Commutability Part 3: Using the Calibration Effectiveness of a Reference Material, *Clin. Chem.*, **64**, 465-474 (2018). Available from <http://clinchem.aaccjnls.org/>.
32. JCGM 100:2008, Evaluation of measurement data – Guide to the expression of uncertainty in measurement. Available from www.bipm.org.
33. ISO/IEC Guide 98-3 (JCGM/WG1/100), Uncertainty of measurement – Part 3: Guide to the expression of uncertainty in measurement (GUM:1995), ISO/IEC, Geneva (2008).
34. S. L. R. Ellison and A. Williams (Eds), *Eurachem/CITAC Guide: Quantifying uncertainty in analytical measurement* (3rd ed. 2012). ISBN 978-0-948926-30-3. Available from www.eurachem.org.
35. Eurolab Technical Report 2007/1, Measurement uncertainty revisited: Alternative approaches to uncertainty evaluation, Eurolab (2007). Available from www.eurolab.org.
36. ISO 21748:2017, Guidance for the use of repeatability, reproducibility and trueness estimates in measurement uncertainty estimation, ISO, Geneva (2017).
37. ISO 11352:2012, Water quality – Estimation of measurement uncertainty based on validation and quality control data. ISO, Geneva (2012).
38. B. Magnusson, T. Näykki, H. Hovind, M. Krysell, E. Sahlin, *Handbook for calculation of measurement uncertainty in environmental laboratories*, Nordtest Report TR 537 (ed. 4) (2017). Available from www.nordtest.info.
39. Commission Directive 2009/90/EC of 31 July 2009 laying down, pursuant to Directive 2000/60/EC of the European Parliament and of the Council, technical specifications for chemical analysis and monitoring of water status, *Official Journal L* 201, 01/08/2009, p36-38.
40. Directive 2008/105/EE of the European Parliament and of the Council of 16 December 2008 on environmental quality standards in the field of water policy, amending and subsequently repealing Council Directives 82/176/EEC, 83/513/EEC, 84/156/EEC, 84/491/EEC, 86/280/EEC and amending Directive 2000/60/EC of the European Parliament and of the Council, *Official Journal L* 348, 24/12/08, p84-97.
41. B. Magnusson and U. Örnemark (Eds.), *Eurachem Guide: The fitness for purpose of analytical methods: A laboratory guide to method validation and related topics* (2nd ed. 2014). ISBN 78-91-87461-59-0. Available from www.eurachem.org.
42. J. Vessman, R. I. Stefan, J. F. van Staden, K. Danzer, W. Lindner, D. Thorburn Burns, A. Fajgelj, and H. Müller, Selectivity in analytical chemistry, (IUPAC Recommendations 2001), *Pure Appl. Chem.*, **73**, 1381-1386 (2001). Available from www.degruyter.com/view/j/pac.

43. L. A. Currie, Nomenclature in evaluation of analytical methods including detection and quantification capabilities (IUPAC Recommendations 1995), *Pure Appl. Chem.*, **67**, 1699-1723 (1995). Available from www.degruyter.com/view/j/pac.
44. ISO 3534-2:2006, Statistics – Vocabulary and symbols – Part 2: Applied statistics, ISO, Geneva (2006).
45. ISO 5725-1:1994, Accuracy (trueness and precision) of measurement methods and results – Part 1: General principles and definitions, ISO, Geneva (1994).