

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ НАУКИ  
ИНСТИТУТ ОБЩЕЙ И НЕОРГАНИЧЕСКОЙ ХИМИИ ИМ.Н.С.КУРНАКОВА  
РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК  
(ИОНХ РАН)

**Рабочая программа дисциплины**  
**МЕТРОЛОГИЯ И ХЕМОМЕТРИКА**

Направление подготовки  
04.06.01 – ХИМИЧЕСКИЕ НАУКИ

Направленность (профиль) программы  
**Аналитическая химия**

Квалификация (степень)  
**Исследователь. Преподаватель-исследователь**

**Нормативный срок обучения – 4 года**  
**Форма обучения – очная**

Москва  
2019 г

## **1. Цели и задачи освоения дисциплины**

Целью учебного курса «Метрология и хемометрика» является расширение и углубление знаний аспирантами по использованию статистических методов в аналитической химии, а также по основным понятиям хемометрики – важной научной дисциплины, возникшей на стыке экспериментальной химии и математики.

Основной задачей изучения данного факультативного курса является формирование у аспирантов углубленных знаний по математической статистике и хемометрике применительно к различным областям аналитической химии.

## **2. Место дисциплины в структуре ОПОП ВО**

Дисциплина «Механические процессы в химической технологии» является факультативной дисциплиной для аспирантов.

Настоящий курс охватывает вопросы математической статистики и их применение в аналитической химии, а также некоторые разделы теории планирования эксперимента. В курсе рассматриваются возможности использования компьютерной обработки результатов химического анализа и методов машинной обработки для получения информации из больших массивов аналитических данных.

Основной целью изучения дисциплины является углубленное ознакомление аспирантов с основополагающими принципами математической статистики и планирования эксперимента и с их практическим использованием на разных этапах химического анализа и исследования веществ и материалов.

## **3. Требования к результатам освоения дисциплины**

В рамках данной дисциплины углубляются и развиваются следующие компетенции:

*Универсальные компетенции:*

- способность к критическому анализу и оценке современных научных достижений, генерированию новых идей при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях (УК-1);

- готовность участвовать в работе российских и международных исследовательских коллективов по решению научных и научно-образовательных задач (УК-3).

*Общепрофессиональные компетенции:*

- способность самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность в соответствующей профессиональной области с использованием современных методов исследования и информационно-коммуникационных технологий (ОПК-1);

- готовность организовать работу исследовательского коллектива в области химии и смежных наук (ОПК-2);

- готовность к преподавательской деятельности по основным образовательным программам высшего образования (ОПК-3).

*Профессиональные компетенции:*

- способность к самостоятельному проведению научно-исследовательской работы и получению научных результатов, удовлетворяющих установленным требованиям к содержанию диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук по специальности 02.00.02 Аналитическая химия (ПК-1);

- владение методами отбора материала, преподавания и основами управления процессом обучения в образовательных организациях высшего образования (ПК-2).

**4. Структура и содержание дисциплины**

Общая трудоемкость дисциплины составляет 2 зачетные единицы (72 часа).

Дисциплина изучается на втором году обучения в аспирантуре. Дисциплина состоит из 4 разделов.

4.1 Структура дисциплины

№ п/п	Наименование дисциплины	Объем учебной работы (в часах)						Вид итогового контроля	
		Все го	Всего аудит.	Из аудиторных					Сам. работа
				Лекц.	Лаб.	Прак	КСР.		
1.	Метрология и хеометрика	72	28	10	18	-	-	44	кандидатский экзамен по специальности

4.2 Содержание дисциплины

4.2.1 Разделы дисциплины и виды занятий

№ п/п	Раздел Дисциплины	Виды учебной работы, и трудоемкость (в часах)				Самостоятельная работа
		Лек.	Лаб.	Пр.	КСР	
1.	Метрологические основы химического анализа	3	5	-	-	11
2.	Законы распределения систематических и случайных погрешностей	3	5	-	-	11
3.	Планирование и оптимизация эксперимента	2	4	-	-	11



4.	Аттестация аккредитация	и	2	4	-	-	11
----	----------------------------	---	---	---	---	---	----

#### 4.2.2 Содержание разделов дисциплины

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Содержание раздела (темы)	Форма проведения занятий
1.	Метрологические основы химического анализа	<p>Химический анализ как метрологическая процедура. Аналитический сигнал. Результат анализа как случайная величина. Погрешности, способы их классификации, основные источники погрешностей в химическом анализе.</p> <p>Систематические погрешности в химическом анализе. Правильность и способы проверки правильности. Постоянная (аддитивная) и пропорциональная (мультипликативная) систематическая погрешность. Систематические погрешности I, II, III рода. Законы сложения погрешностей. Релятивизация, контрольный опыт. Рандомизация.</p> <p>Случайные погрешности в химическом анализе. Генеральная и выборочная совокупности результатов химического анализа. Закон нормального распределения. Статистика малых выборок. Воспроизводимость. Статистические критерии: математическое ожидание (генеральное среднее) и генеральная дисперсия случайной величины, выборочное среднее, дисперсия, стандартное отклонение, доверительная вероятность и доверительный интервал. Характер связи между значением величины и ее стандартным отклонением (абсолютным и относительным).</p> <p>Возможные причины отклонения результатов анализа от нормального распределения. Распределение Пуассона. Проверка нормального закона распределения результатов анализа. Построение гистограмм распределения. Критерий Пирсона.</p> <p>Статистическая обработка результатов серийных анализов. Выявление промахов. Контрольные карты. Сравнение двух (критерий Фишера) и нескольких (критерии Бартлера, Кокрена)</p>	Лекции, лабораторные, самостоятельная работа аспиранта

		<p>дисперсий. Сравнение двух (критерий Стьюдента) и нескольких (критерий Фишера) средних результатов химического анализа.</p> <p>Чувствительность. Коэффициент чувствительности. Предел обнаружения, нижняя граница определяемых содержаний, их статистическая оценка. Пути повышения чувствительности методик анализа.</p>	
2.	Закон распределения систематических и случайных погрешностей	<p>Погрешности отдельных стадий анализа и конечного результата. Применение дисперсионного анализа для оценки погрешностей отдельных стадий и операций химического анализа.</p> <p>Проверка значимости выборочного коэффициента корреляции. Использование корреляционного анализа для проверки независимости двух методик.</p> <p>Применение регрессионного анализа для построения градуировочных зависимостей. Способы проверки адекватности регрессионной модели. Нахождение содержания вещества по градуировочной зависимости, статистическая оценка результата.</p>	Лекции, лабораторные, самостоятельная работа аспиранта
3.	Планирование и оптимизация эксперимента	<p>Математическое планирование и оптимизация аналитического эксперимента. Использование дисперсионного и многомерного регрессионного анализа в планировании эксперимента. Оценка значимости факторов. Планы второго порядка. Симплекс-оптимизация.</p>	Лекции, лабораторные, самостоятельная работа аспиранта
4.	Аттестация и аккредитация	<p>Метрологическое обеспечение контроля состава веществ и материалов. Стандартные образцы. Аттестация и стандартизация методик. Аккредитация аналитических лабораторий.</p>	Лекции, лабораторные, самостоятельная работа аспиранта

## 5. Образовательные технологии

Основными образовательными технологиями, используемыми при реализации учебной работы, являются лекции ведущих отечественных и зарубежных ученых и консультации с преподавателями, проведение лабораторных работ в лаборатории, участие обучаемых в научной работе и выполнение исследовательских проектов.

**6. Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы аспирантов. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины.**



Самостоятельная работа аспирантов предполагает проработку лекционного материала в читальном зале библиотеки, в лабораториях, с доступом к лабораторному оборудованию, приборам, базам данных, к ресурсам Интернет. Кроме того, аспирантам предлагается конспектирование и проработка материала научных докладов на заседаниях Ученого Совета ИОНХ РАН, его секций, диссертационных советов по специальности, участие в работе научных конференций и школ, работа в библиотеке и на сайтах электронных изданий.

Форма контроля знаний – экзамен в конце курса, включающий теоретические вопросы.

### 7. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

При изучении дисциплины аспиранты используют основную и дополнительную литературу, рекомендованную преподавателем. Кроме того, преподаватель может рекомендовать аспиранту ознакомиться с дополнительными материалами методического характера.

Название электронного или печатного ресурса (основная или дополнительная)	Тип	Кол-во экз.
<b>Основная литература:</b> Основы аналитической химии. В 2-х книгах. Под ред. Ю.А. Золотова. М.: Высшая школа, 2000 г.	печ.	2
Шараф М.А., Иллмэн Д.Л., Ковальски Б.Р. Хемометрика. Пер. с англ. Л.:Химия. 1989 г.	печ.	1
Дёрффель К. Статистика в аналитической химии. М.:Мир. 1994 г.	печ.	1
<b>Дополнительная литература:</b> Дворкин В.И. Метрология и обеспечение качества количественного химического анализа. М.: Химия, 2001.	печ.	2
Плинер Ю.Л., Кузьмин Н.М. Метрологические проблемы аналитического контроля качества металлопродукции. М.: Металлургия. 1989 г.	печ.	2
Аналитический контроль металлургического производства. Под ред. Ю.А. Карпова. М.: Металлургия. 1995.	печ.	3

### Интернет-ресурсы:

1. E-library – российская научная электронная библиотека в области науки, технологии, медицины и образования;
2. Web of Science – база данных для поиска научной информации в области естественных, общественных, гуманитарных наук и искусства;
3. Scopus - библиографическая и реферативная база данных и инструмент для отслеживания цитируемости статей, опубликованных в научных изданиях;
4. Springer – научные и научно-популярные журналы.

### Программное обеспечение:

- СИСТЕМНЫЕ ПРОГРАММНЫЕ СРЕДСТВА: Microsoft Windows;
- ПРИКЛАДНЫЕ ПРОГРАММНЫЕ СРЕДСТВА: Microsoft Office, Mozilla FireFox.

## **8. Материально-техническое обеспечение дисциплины**

Институт общей и неорганической химии располагает материально-технической базой, соответствующей требованиям Федерального государственного образовательного стандарта по направлению подготовки 04.06.01 Химические науки (уровень подготовки кадров высшей квалификации).

Аудитории для проведения занятий оснащены компьютерами и проекторами для показа мультимедийных презентаций. Компьютеры, объединенные в локальную сеть с выходом в Интернет и подключенные к международным и российским научным базам данных и электронной библиотеке с основными международными научными журналами.

Материально-техническая база соответствует действующим противопожарным правилам и нормам и обеспечивает проведение всех видов дисциплинарной и междисциплинарной подготовки, практической и научно-исследовательской работы аспирантов.

Программа составлена в соответствии с требованиями следующих нормативных документов:

1. Федеральный закон «Об образовании в Российской Федерации» от 29.12.2012 г. № 273-ФЗ;
2. Приказ Минобрнауки России от 30 июля 2014 г. № 869 «Об утверждении федерального государственного образовательного стандарта высшего образования по направлению подготовки 04.06.01 – Химические науки (уровень подготовки кадров высшей квалификации)»;
3. Приказ Министерства образования и науки РФ от 19.11.2013 №1259 «Об утверждении Порядка организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам высшего образования – программам подготовки научно-педагогических кадров в аспирантуре (адъюнктуре)».

### **Автор(ы) программы:**

Вед.н.с., д.х.н.



В.Б. Барановская