

МИНПРОСВЕЩЕНИЯ РОССИИ

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования
"Тульский государственный педагогический университет им. Л.Н. Толстого"
(ФГБОУ ВО "ТГПУ им. Л.Н. Толстого")

**АНАЛИТИЧЕСКАЯ ХИМИЯ И ФИЗИЧЕСКИЕ
МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ
Хеометрика**

рабочая программа дисциплины (модуля)

Закреплена за кафедрой	кафедра химии
ОПОП	Направление 04.03.01 Химия направленность (профиль) Медицинская и фармацевтическая химия
Квалификация	Бакалавр
Год начала подготовки	2023
Форма обучения	очная
Общая трудоемкость	2 з.е.

Виды контроля по семестрам:
зачет 2

Семестр(Курс.Номер семестра на курсе)	2(1.2)		Итого	
	УП	РПД	УП	РПД
Лекции	16	16	16	16
Лабораторные	24	24	24	24
Итого ауд.	40	40	40	40
КСР	6	6	6	6
Контактная работа	46	46	46	46
Сам. работа	26	26	26	26
Часы на контроль	0	0	0	0
Практическая подготовка	0	0	0	0
Семинары	0	0	0	0
Консультации	0	0	0	0
Итого трудоемкость в часах	72	72	72	72

Программу составил(и):

к.х.н., доцент, Стелпиль Надежда Дмитриевна

Рабочая программа дисциплины

Хемотриметрия

разработана в соответствии с ФГОС:

Федеральный государственный образовательный стандарт высшего образования - бакалавриат по направлению подготовки 04.03.01 Химия (приказ Минобрнауки России от 17.07.2017 г. № 671)

составлена на основании учебного плана:

Направление 04.03.01 Химия

направленность (профиль) Медицинская и фармацевтическая химия

утвержденного Учёным советом вуза от 27.10.2022 протокол № 13.

РПД утверждена Учёным советом университета

протокол от 27.10.2022 г. № 13

1. ЦЕЛИ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Достижение планируемых результатов обучения, соотношенных с общими целями и задачами ОПОП, является целью освоения дисциплины.

2. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ООП

Цикл (раздел) ООП:	Б1.О.09
2.1	Требования к предварительной подготовке обучающегося:
1.	История и методология химии, Основы микробиологии
2.	История и методология химии
3.	Основы микробиологии
2.2	Дисциплины и практики, для которых освоение данной дисциплины (модуля) необходимо как предшествующее:
1.	Аналитическая химия, Неорганические лекарственные вещества, Строение молекул и основы квантовой химии, Неорганический синтез, Физическая химия, Экологическая безопасность, Коллоидная химия, Органическая химия, Основы токсикологической химии, Основы фармакогнозии, Физико-химические методы анализа, Биологически активные вещества, Биохимия, Биохимия, Методы анализа лекарственных веществ, Основы медицинской химии, Основы нанохимии, Основы фармацевтической химии, Химическая технология, Химия наночастиц, Анализ объектов окружающей среды, Органический синтез, Молекулярная биология, технологическая практика. преддипломная практика.
2.	Аналитическая химия
3.	Неорганические лекарственные вещества
4.	Строение молекул и основы квантовой химии
5.	Неорганический синтез
6.	Физическая химия
7.	Экологическая безопасность
8.	Коллоидная химия
9.	Органическая химия
10.	Основы токсикологической химии
11.	Основы фармакогнозии
12.	Физико-химические методы анализа
13.	Биологически активные вещества
14.	Биохимия
15.	Методы анализа лекарственных веществ
16.	Основы медицинской химии
17.	Основы фармацевтической химии
18.	Практикум по решению задач
19.	Решение задач повышенной сложности
20.	Химическая технология
21.	Анализ объектов окружающей среды
22.	Биотехнология
23.	Органический синтез
24.	Производственная технологическая практика
25.	Химия высокомолекулярных соединений
26.	Молекулярная биология
27.	Производственная преддипломная практика

3. СООТНЕСЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ ОБУЧЕНИЯ ПО ДИСЦИПЛИНЕ (МОДУЛЮ) С ИНДИКАТОРАМИ ДОСТИЖЕНИЯ КОМПЕТЕНЦИЙ

3.1 Компетенции обучающегося и индикаторы их достижения:

ОПК-3: Способен применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники

ОПК-3.1	Применяет теоретические и полуэмпирические модели при решении задач химической направленности применение расчетно-теоретических методов для изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники
ОПК-3.2	Использует стандартное программное обеспечение при решении задач химической направленности

ОПК-4: Способен планировать работы химической направленности, обрабатывать и интерпретировать полученные результаты с использованием теоретических знаний и практических навыков решения математических и физических задач	
ОПК-4.1	Использует базовые знания в области математики и физики при планировании работ химической направленности
ОПК-4.2	Обрабатывает данные с использованием стандартных способов аппроксимации численных характеристик
ОПК-4.3	Интерпретирует результаты химических наблюдений с использованием физических законов и представлений
ПК-1: Способен применять фундаментальные знания химии для решения профессиональных задач разного уровня	
ПК-1.1	Применяет на практике фундаментальные знания из различных областей химии
3.2 Результаты обучения по дисциплине:	
В результате освоения дисциплины обучающийся должен:	
	Знать:
3.1	ПК-1.1: применение фундаментальных знаний химии для решения профессиональных расчётных задач разного уровня
3.2	ОПК-4.1: планирование работ химической направленности, обработку и интерпретацию полученных результатов измерений величин с использованием теоретических знаний и практических навыков решения математических и физических задач
3.3	ОПК-3.1: применение расчетно-теоретических методов для изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники
	Уметь:
У.1	ПК-1.2: применять фундаментальные знания химии для решения профессиональных расчётных задач разного уровня
У.2	ОПК-4.2: планировать работы химической направленности, обрабатывать и интерпретировать полученные результаты измерений с использованием теоретических знаний и практических навыков решения математических и физических задач
У.3	ОПК-3.2: применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники
	Владеть:
В.1	ПК-1.3: применения фундаментальных знаний химии для решения профессиональных расчётных задач разного уровня
В.2	ОПК-4.3: планирования работ химической направленности, обработку и интерпретацию полученных результатов измерений величин с использованием теоретических знаний и практических навыков решения математических и физических задач
В.3	ОПК-3.3: применения расчетно-теоретических методов для изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники

4. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Код занятия	Наименование разделов и тем /вид занятия/	Семестр / Курс	Часов	Литература	Содержание
	Статистическая обработка результатов химического анализа.				

1.1	<p>1. Введение. Основные понятия.</p> <p>2. Виды ошибок.</p> <p>3. Эмпирические и теоретические распределения частот.</p> <p>4. Закон распределения ошибок. Статистические методы проверки.</p> <p>5. Простой дисперсионный анализ.</p> <p>/Лек/</p>	2	10	Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4 Л2.1 Л2.2 Л2.3	
1.2	<p>1. Виды ошибок в аналитической химии.</p> <p>2. Построение графиков в программе MS Excel.</p> <p>3. Выявление различных видов ошибок. Построение графиков использованием электронных программ.</p> <p>4. Вычисление статистических характеристик.</p> <p>5. Эмпирические и теоретические распределения частот.</p> <p>6. Статистические методы проверки ошибок.</p> <p>7. Закон распространения ошибок.</p> <p>8. Статистическая проверка результатов анализа с использованием программ MS Excel и Sigma Plot.</p> <p>9. Простой и дисперсионный анализ.</p> <p>/Лаб/</p>	2	18	Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4 Л2.1 Л2.2 Л2.3	

1.3	<p>1. Виды ошибок в аналитической химии.</p> <p>2. Построение графиков в программе MS Excel.</p> <p>3. Выявление различных видов ошибок. Построение графиков использованием электронных программ.</p> <p>4. Вычисление статистических характеристик.</p> <p>5. Эмпирические и теоретические распределения частот.</p> <p>6. Статистические методы проверки ошибок.</p> <p>7. Закон распространения ошибок.</p> <p>8. Статистическая проверка результатов анализа с использованием программ MS Excel и Sigma Plot.</p> <p>9. Простой и дисперсионный анализ. Решение задач по темам.</p> <p>/Ср/</p>	2	14	Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4Л2.1 Л2.2 Л2.3	
1.4	<p>1.Основные понятия.</p> <p>2.Виды ошибок.</p> <p>3.Эмпирические и теоретические распределения частот.</p> <p>4.Закон распределения ошибок. Статистические методы проверки.</p> <p>5.Простой дисперсионный анализ.</p> <p>/КСР/</p>	2	3	Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4Л2.1 Л2.2 Л2.3	
	Градуировочные, корреляционные зависимости				
2.1	<p>6. Градуировка. Общие представления.</p> <p>7. Построение градуировочных функций.</p> <p>8. Оптимизация и планирование эксперимента.</p> <p>/Лек/</p>	2	6	Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4Л2.1 Л2.2 Л2.3	
2.2	<p>1.Градуировка, общие представления. Построение градуировочных функций.</p> <p>2.Регрессионный и корреляционный анализ.</p> <p>3.Оптимизация и планирование эксперимента.</p> <p>/Лаб/</p>	2	6	Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4Л2.1 Л2.2 Л2.3	

2.3	1.Градуировка, общие представления. Построение градуировочных функций. 2.Регрессионный и корреляционный анализ. 3.Оптимизация и планирование эксперимента. /Ср/	2	12	Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4Л2.1 Л2.2 Л2.3	
2.4	1.Градуировка. Общие представления. 2.Построение градуировочных функций. 3.Оптимизация и планирование эксперимента. /КСР/	2	3	Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4Л2.1 Л2.2 Л2.3	

5. ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ

5.1. Типовые задания для проведения текущего контроля

Тест 1. Виды ошибок в аналитической химии. Эмпирические распределения частот.

1. Погрешности, вызванные постоянно действующей причиной, постоянные во всех измерениях или меняющиеся по постоянно действующему закону, которые можно выявить и устранить, называются
 - а) случайными;
 - б) систематическими;
 - в) грубыми.
2. Степень близости друг к другу единичных определений или рассеяние единичных результатов относительно среднего характеризуется
 - а) правильностью;
 - б) точностью;
 - в) воспроизводимостью;
 - г) сходимостью.
3. Погрешности, обусловленные методикой определения, называют
 - а) случайными;
 - б) систематическими;
 - в) грубыми;
 - д) методическими;
 - е) инструментальными;
 - ж) оперативными.
4. Способ выявления систематической погрешности, основанный на анализе образцов, изготовленных из материала, состав и свойства которого надежно установлены и максимально близки к составу и свойствам анализируемой пробы, называют
 - а) варьированием величины пробы;
 - б) анализом стандартного образца;
 - в) способом проведения холостого опыта.
5. В качестве границ разброса в аналитической химии используют
 - а) относительную погрешность;
 - б) стандартное отклонение;
 - в) размах варьирования;
 - г) доверительный интервал.
6. По способу вычисления различают погрешности...
 - а) абсолютные;
 - б) относительные;
 - в) грубые;
 - г) методические;
 - д) оперативные.
7. Способ выявления систематических погрешностей, основанный на увеличении размера пробы в кратное число раз, называют
 - а) варьированием величины пробы;
 - б) анализом стандартного образца;
 - в) способом проведения холостого опыта.
8. Качество химического анализа, отражающее близость к нулю систематической погрешности, называют
 - а) правильностью;
 - б) точностью;
 - в) воспроизводимостью;
 - г) сходимостью.
9. При определении содержания свинца в сплаве были получены следующие результаты (%): 14,50; 14,43; 14,54; 14,45; 14,44; 14,52; 14,58; 14,40; 14,25; 14,49. Медиана равна
 - а) 14,43;
 - б) 14,44;
 - в) 14,45;
 - г) 14,46;
 - д) 14,47;
 - е) 14,48;
 - ж) 14,49.
10. Арифметическое среднее значение содержания свинца в сплаве в соответствии с данными задания 6 равно:
 - а) 14,43;
 - б) 14,44;
 - в) 14,45;
 - г) 14,46;
 - д) 14,47;
 - е) 14,48;
 - ж) 14,49.

Тест 2. Теоретические распределения частот.

1. С уменьшением средней квадратичной ошибки ширина нормального гауссовского распределения
 - а) уменьшается;
 - б) увеличивается;
 - в) не изменяется.
2. Укажите пределы гауссовского интеграла, в которых лежит 99,73 % всех результатов
 - а) ;
 - б) ;
 - в) .
3. Для описания распределения частот, выражаемых только целыми числами, используют
 - а) распределение Стьюдента;
 - б) распределение Фишера;
 - в) распределение Пуассона;
 - г) -распределение.
4. Установите соответствие между распределениями и их графическими изображениями
 - а) нормальное распределение;
 - б) распределение Фишера;
 - в) -распределение;
 - г) распределение Пуассона.

Рисунок 1.	Рисунок 2.	Рисунок 3.
5. При t -распределение переходит		
а) в нормальное распределение;		в) в χ^2 -распределение;
б) в распределение Фишера;		г) в распределение Пуассона.
6. При проведении n_j параллельных измерений для каждого компонента выборки x_1, x_2, \dots, x_m между средней квадратичной ошибкой, рассчитанной с учетом параллельных измерений, и средней квадратичной ошибкой генеральной совокупности устанавливается соотношение		
а) ;	б) ;	в) ;
		г) .
7. При малом числе измерений используют		
а) распределение Стьюдента;		в) распределение Пуассона;
б) распределение Фишера;		г) χ^2 -распределение.
8. Часть площади фигуры, ограниченной гауссовым интегралом, выраженная в процентах от всей площади, называется		
а) доверительным интервалом;	б) статистической надежностью;	в) доверительной надежностью.
9. При анализе стандартного образца на содержание серебра были получены следующие результаты: 1,29; 1,28; 1,33; 1,44; 1,47. Определите среднюю квадратичную ошибку.		
10. Используемый в задании 6 метод определения серебра		
а) имеет систематическую ошибку;		б) не имеет систематической ошибки;
в) сделать однозначный вывод о наличии систематической ошибки невозможно.		
Ответ подтвердите расчетами ($t=2,78$).		

Тест 3. Градуировка. Построение градуировочных функций. Оптимизация и планирование эксперимента.

Вариант 1.

- Последовательность операций, предназначенных для установления соответствия (при заданных условиях) между показаниями измерительного прибора или измерительной системы либо иными количественными характеристиками измеряемых объектов и соответствующими величинами для образцов сравнения, называются
 - стандартизацией;
 - градуировкой;
 - холостым опытом.
- К факторам, определяющим качество градуировки, относятся
 - правильность аттестации образцов сравнения;
 - воспроизводимость результатов измерений;
 - состав образцов сравнения;
 - корректность процедуры сравнения.
- Методики, основанные на относительных методах, но не включающие в себя процедуру градуировки непосредственно перед выполнением измерений и, как следствие, характеризующиеся обычно низкой точностью, называют
 - абсолютными;
 - безэталоными;
 - качественными;
 - количественными.
- Диапазон концентраций определяемого компонента, в котором выполняется установленное соотношение между концентрацией и сигналом, называют
 - градуировочной зависимостью;
 - динамическим диапазоном методики;
 - рабочим диапазоном методики.
- Способ градуировки, при котором пробу предварительно разделяют на несколько равных частей и к каждой добавляют различные количества определяемого компонента, называют
 - внешней градуировкой;
 - способом добавок;
 - внутренней градуировкой;
 - изотопным разбавлением.
- Коэффициент корреляции может принимать значения в следующем диапазоне
 - больше нуля;
 - от 0 до 1;
 - больше единицы;
 - от -1 до +1.
- Графическое выравнивание результатов проводят «канальным» методом по Вернеру, если
 - число результатов измерений крайне мало;
 - разброс значений измерений велик;
 - число результатов измерений очень велико;
 - разброс значений измерений очень мал.
- Низкая точность безэталонных методик анализа обусловлена
 - полным отсутствием процедуры градуировки;
 - большими временными промежутками между градуировками;
 - специфичность используемых приборов.
- Разновидность градуировки, при которой образцы сравнения измеряют отдельно от анализируемой пробы, называется
 - внешней градуировкой;
 - способом добавок;
 - внутренней градуировкой;
 - изотопным разбавлением.
- В способе градуировки, называемом изотопным разбавлением, меткой является
 - вещество, максимально отличающееся от определяемого;
 - максимально близкое к определяемому и в то же время отличное от него;
 - вещество, содержащее изотоп ^{13}C .

Контрольные работы

Контрольная работа №1. Распределения частот. Статистические методы проверки.

Вариант 1.

- В результате анализа стали получены следующие данные по содержанию никеля (%): 21,22; 20,45; 22,85; 20,90; 23,74; 19,08; 24,45; 22,15; 21,95; 24,20. Присутствует ли в результатах грубая ошибка? Ответ подтвердите расчетами.
- При анализе двух образцов минерального удобрения, содержащего согласно паспорту 20,50 % фосфора, получены следующие данные 1) 20,05; 21,80; 19,45; 22,10; 2) 18,95; 22,08; 21,00; 20,25. Можно ли утверждать, что методика анализа имеет систематическую погрешность и какова ее точность?
- При определении содержания нитрат-иона в растительном продукте двумя разными методами получены следующие результаты (%): 1) 0,85; 1,01; 0,92; 2) 1,08; 0,81; 0,98. Одинаковой ли точностью обладают используемые методы? Оценку проведите с использованием критерия Фишера.

Контрольная работа №2. Градуировка. Построение градуировочных функций.

Вариант 1.

В результате полярографических измерений стандартных растворов меди (II) полученные следующие данные:

Концентрация меди, мг/мл	0,25	0,5	1,0	1,5	2,0
Высота полярографической волны, мм	4,00	9,00	17,50	26,25	35,00

а) Используя метод наименьших квадратов, рассчитать параметры уравнения градуировочного графика, их доверительные интервалы и коэффициент корреляции.

б) При анализе раствора меди (II) неизвестной концентрации высота полярографической волны составила 15,25 мм.

Определите концентрацию меди в анализируемом растворе, укажите доверительный интервал.

Защита лабораторных работ

Вопросы для защиты лабораторных работ приведены в методическом пособии

Основы хемометрики: Авт.-сост. Севостьянова Н.Т., Баташев С.А.

Задания для СРС

Самостоятельное творческое задание

Требования к индивидуальным творческим заданиям

Самостоятельное творческое задание направлено на формирование у студентов целостного представления о дисциплине, самостоятельное знакомство студентов с различными методами количественного химического анализа, формирование научной основы для последующего изучения других разделов аналитической химии.

Индивидуальное творческое задание включает создание студентом расчетной задачи и ее решение. Содержание задачи, созданной студентом, не должно дублировать задачи, решенные на лабораторных занятиях и выданные преподавателем для внеаудиторной работы. Эта задача разрабатывается студентом самостоятельно и не является копией задачи из учебника или задачника. В качестве источников справочного материала для задачи могут использоваться учебники, учебные пособия, задачники, лабораторные практикумы, монографии, научные статьи, опубликованные в печатном виде или на специализированных химических учебно-научных сайтах или сайтах из списка рекомендуемой литературы.

Структура разработанной студентом задачи

1. Условие расчетной задачи, основанное на результатах количественного анализа. Условие задачи может содержать справочный материал, например описание конкретного метода и методики анализа, взятый из лабораторного практикума, научной статьи, монографии и т.д.

2. Формулировка задания или вопроса (что конкретно нужно найти, рассчитать, установить и т.д.).

3. Решение задачи (должно содержать используемые для расчетов формулы и сами расчеты в подробном виде).

4. Ответ (должен быть развернутым и соответствовать задаче или вопросу по п. 2).

5. Список использованной литературы (и/или электронных источников).

При разработке задачи студенты должны использовать как можно больше элементов из разных тем дисциплины. Курс

«Хемометрика» включает в себя 2 основных раздела:

1) статистические характеристики;

2) градуировка, оптимизация и планирование эксперимента.

За использование каждого из указанных разделов в задаче студенту начисляется по 1,5 балла. Студент получает 3 балла. В конечном счете баллы за задачу складываются из следующих составляющих:

1) использование в условии задачи материала из различных разделов дисциплины – 3 балла;

2) оценка корректности формулировки задачи – 3 балла;

3) использование справочного материала – 1 балл;

4) решение задачи (с учетом степени ее сложности) – 4 балла;

5) формулировка ответа – 2 балла;

Таким образом, максимально за выполнение индивидуального творческого задания студент может заработать 13 баллов, что соответствует балльно-рейтинговой системе по дисциплине. Индивидуальное творческое задание может быть выполнено в рукописном или электронном виде и сдано преподавателю на бумажном (и/или электронном носителе) не позднее 2 недель до зачета. Бумажный вариант должен быть написан или распечатан четко, разборчиво. Наличие опечаток и ошибок в тексте, математических и химических формулах, уравнениях химических реакций не допустимо.

Требования к оформлению бумажного и электронного варианта задания (в случае набора на компьютере): документ в формате MS Word. Размер бумаги А4, поля: слева – 3 см, справа, сверху, снизу – по 2 см. Шрифт Times New Roman 12 пт., интервал 1,5. Страницы должны быть пронумерованы (первой страницей является титульный лист, на нем номер не печатается).

При работе над индивидуальным творческим заданием студентам рекомендуется использовать литературу из списка рекомендуемой основной и дополнительной литературы по дисциплине, а также следующие источники:

1. Основы аналитической химии. Практическое руководство: Учеб. пособие для вузов / В.И. Фадеева, Т.Н. Шеховцова, В.М. Иванов и др.; Под ред. Ю.А. Золотова. – М.: Высш. шк., 2001. – 463 с.: ил.

2. Практикум по аналитической химии и физико-химическим методам анализа: Учеб. пособие / И.В. Тикунова, И.А. Шаповалов, А.И. Артеменко. – М.: Высш. Шк., 2006. – 208 с.: ил.

Студент также могут использовать и другую учебную и научную литературу по желанию.

5.2. Типовые задания для проведения промежуточной аттестации

Вопросы к зачету по дисциплине

1. Сформулируйте предмет, задачи и методы хемометрики.

2. Классификация погрешностей по способу вычисления: абсолютные и относительные погрешности.

3. Классификация погрешностей по характеру вызывающих их причин: систематические (инструментальные, методические, реактивные, оперативные, личные), случайные погрешности, промахи.
4. Опишите способы выявления систематической погрешности.
5. Что такое аналитический сигнал фона?
6. Для чего используется холостой опыт?
7. Характеристики анализа: воспроизводимость, правильность, точность.
8. Понятия генеральной совокупности и выборки.
9. Анализ соотношения величин систематической и случайной ошибок как фактор выбора метода анализа.
10. Опишите формы представления одномерного распределения.
11. Дайте определения статистическим характеристикам (средние значения, границы разброса, асимметрия и эксцесс), приведите формулы для их расчета.
12. Двумерное распределение: характеристики распределения, области применения.
13. Дайте характеристику нормального или гауссова распределения.
14. Что такое статистическая надежность?
15. Как рассчитать доверительный интервал среднего значения с односторонней и двусторонней границами?
16. Изобразите вид функциональной зависимости распределения Пуассона. Какими величинами оно характеризуется?
17. Зависимость формы t-распределения от числа степеней свободы, переход t-распределения в нормальное распределение.
18. Кривая F-распределения, формула для расчета F-критерия.
19. Кривая χ^2 -распределения, зависимость формы кривой от числа степеней свободы, формула для расчета.
20. Покажите связь между отдельными теоретическими распределениями.
21. Как рассчитать общую ошибку в случае некоррелированных переменных?
22. Вычисление общей ошибки в случае сложения, вычитания, умножения и деления измеряемых величин.
23. Расчет ошибки взвешивания.
24. Покажите применение закона распространения ошибок к различным методам аналитической химии.
25. Что такое статистическая гипотеза?
26. Дайте определения ошибки первого и второго рода.
27. Как определяется допустимый процент возможных ошибок?
28. Как проводят сравнение двух средних квадратичных ошибок?
29. Сравнение нескольких средних квадратичных ошибок (критерий Бартлетта).
30. Сравнение двух средних значений (t-критерий).
31. Определение грубых ошибок: Q-критерий.
32. Чем обусловлена необходимость использования простого дисперсионного анализа?
33. Как рассчитать среднюю квадратичную ошибку воспроизводимости и ошибку сопоставимости?
34. Опишите ход простого дисперсионного анализа.
35. Каковы могут быть источники случайной ошибки?
36. Дайте определения понятиям градуировки, стандарта, первичного и вторичного стандартов, рабочего образца сравнения.
37. Какие факторы определяют качество градуировки?
38. Какие существуют альтернативные пути решения проблемы проверки правильности измерительной процедуры?
39. Какова должна быть частота повторных градуировок?
40. Чем различаются абсолютные и относительные методы анализа?
41. Приведите общую схему процедуры градуировки.
42. Дайте определения следующим характеристикам градуировочных моделей коэффициенту чувствительности, рабочему и динамическому диапазону методики; аналитическим моделям.
43. Опишите различные способы градуировки.
44. Сформулируйте задачи регрессионного анализа и корреляции.
45. Что такое коэффициент корреляции, как его рассчитать?
46. Графическое определение констант.
47. Построение линии регрессии при сильно разбросанных значениях измерений.
48. Построение линии регрессии при очень большом количестве точек измерений.
49. В чем заключается сущность метода наименьших квадратов?
50. Расчет констант линейных функций и их доверительных интервалов.
51. Расчет зависимых переменных и их доверительных интервалов.
52. Дайте определения следующим понятиям: факторы (параметры или входы), выход (оптимизируемый параметр или функция отклика), факторное пространство, поверхность отклика, математическое описание процесса или математическая модель.
53. Опишите систематический ход процедуры оптимизации.
54. Приведите основные принципы планирования экспериментов.
55. Опишите методы полного факторного эксперимента и дробных реплик.
56. Как составляется матрица планирования эксперимента?
57. Что такое дробный факторный эксперимент?
58. Как проводят оптимизацию по методу крутого восхождения?

5.3. Перечень видов оценочных средств

Для оценки успеваемости студентов по дисциплине проводятся следующие виды контроля:

- 1) текущий контроль умений проводить статистические расчеты по результатам химического анализа и анализировать результаты химических исследований, а также оптимизацию и планирование эксперимента с применением методов статистики проводится в форме тестирования, контрольных работ №1 и 2, самостоятельного творческого задания,

а также на практических занятиях;

2) текущий контроль навыков градуировки различными методами, построения градуировочных функций и расчета основных статистических характеристик, в том числе с помощью электронных программ, проводится на практических занятиях в фронтальной форме, а также с использованием контрольной работы №2, самостоятельного творческого задания. Проверка умений и навыков, проводимая на практических занятиях, осуществляется при самостоятельном выполнении студентами заданий с применением электронных программ MS Excel и SigmaPlot и включает проверку правильности графических построений и расчетов, обсуждение полученных результатов.

3) Итоговый контроль – вид контроля, проводимый по завершению изучения дисциплины в семестре, проводится в форме зачета с применением тестовых, расчетных заданий, а также в устной беседе студента с преподавателем.

Для анализа степени усвоения учебного материала по дисциплине преподавателем и студентами используется балльно-рейтинговая система.

При оценке знаний учебного материала учитываются следующие качественные показатели:

а) глубина, которая характеризуется знанием теоретических и практических разделов курса;

б) полнота знаний, которая соответствует объему программы информации основных учебных пособий;

в) осознанность, которая характеризуется умением конкретизировать полученную информацию на конкретных примерах при устных ответах на семинарах, коллоквиуме и при решении задач.

Все знания, умения и навыки студента оцениваются в баллах. Общая оценка знаний студента по данной дисциплине определяется как сумма баллов, полученных студентом при прохождении всех видов контроля знаний. Успешность изучения данной дисциплины, завершающейся зачетом, оценивается суммой баллов, исходя из 100 максимально возможных, и включает следующие составляющие:

Итоговая оценка = работа в семестре 80 баллов + ответ на зачете 20 баллов.

Максимальная сумма баллов, которую студент может набрать в течение семестра за выполнение лабораторных работ, контрольной работы, тестовых заданий и индивидуальных заданий по темам, сдачу коллоквиума, активность на занятиях и посещаемость 80 баллов.

Минимальное количество баллов, позволяющее считать дисциплину освоенной, составляет 41 балл.

5.4. Процедура применения оценочных материалов

Описание балльно-рейтинговой системы по дисциплине

№ п/п	Вид деятельности студента	Кол-во в семестре	Кол-во баллов
1.	Посещение лекционного занятия, наличие конспекта лекций – 0,5 балла за 1 занятие.	16	8
2.	Посещение лабораторного занятия и активная работа с оформлением материала в тетради (при наличии выполненного домашнего задания) – 1 балл за 1 занятие.	24	
3.	Выполнение тестовых заданий – 5 баллов за один тест.	3	15
4.	Выполнение контрольной работы – 10 баллов.	2	20
5.	Выполнение индивидуального творческого задания – 13 баллов.	1	13
	Итого:	80	
7.	Зачет 1	20	
	Итого:	100	

Критерии оценки знаний студентов на зачете

Оценка Требования

«Зачтено»

Оценка «зачтено» выставляется студенту, если он знает основные понятия в области статистической обработки результатов, градуировки, оптимизации и планирования эксперимента, владеет формулами для расчета основных статистических характеристик, в течение курса выполнял задания с использованием электронных программ, проверочные задания и отчитался по заданию для самостоятельной работы, отвечает на поставленные вопросы по темам дисциплины, справляется с задачами, тестами и другими видами применения знаний.

«Не зачтено» Оценка «Не зачтено» выставляется студенту, который не знает значительной части программного материала, допускает существенные ошибки, неуверенно, с большими затруднениями выполнял лабораторные работы (не выполнил работы).

6. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

6.1. Рекомендуемая литература

6.1.1. Основная литература

	Авторы, составители	Заглавие	Издательство, год (кол-во экземпляров для печатных изданий)	Ссылка на электронное издание
Л1.1	Шурыгина Л. И., Суровой Э. П.	Методы оптимизации химического эксперимента: учебное пособие	, 2009	http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=232734
Л1.2	Шурыгина Л. И., Суровой Э. П.	28: учебное пособие	, 2011	http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=232735

	Авторы, составители	Заглавие	Издательство, год (кол-во экземпляров для печатных изданий)	Ссылка на электронное издание
Л1.3	Шрайбман Г. Н., Халфина П. Д., Булгакова О. Н., Иванова Н. В., Шрайбман Г. Н.	Решение задач по аналитической химии: учебное пособие	, 2015	http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=437487
Л1.4	Севостьянова Н. Т., Баташев С. А., Шахкельдян И. В.	Основы хемометрики: Учебно-методическое пособие для лабораторно-практических занятий	, 2010 (9 шт.)	http://rucont.ru/efd/186551?cldren=0

6.1.2. Дополнительная литература

	Авторы, составители	Заглавие	Издательство, год (кол-во экземпляров для печатных изданий)	Ссылка на электронное издание
Л2.1	Апарнев А. И., Лупенко Г. К., Александрова Т. П., Казакова А. А.	Аналитическая химия: учебное пособие	, 2011	http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=228946
Л2.2	Ананьев В. А.	Анализ экспериментальных данных: учебное пособие	, 2009	http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=232208
Л2.3	ред. Ю. А. Золотов	Основы аналитической химии: Учебник для студентов химического направления и химических специальностей вузов. В 2 томах	Академия, 2010 (4 шт.)	

6.2. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети "Интернет"

Э1	1. Национальный цифровой ресурс Руконт. Электронная библиотечная система [Электронный ресурс].
Э2	Университетская библиотека Он-лайн. [Электронный ресурс].
Э3	Научная электронная библиотека. [Электронный ресурс].

6.3. Информационные технологии

6.3.1 Перечень лицензионного и свободно распространяемого программного обеспечения

1.	Операционная система ROSA Enterprise Linux Desktop № RL00450-1-110518-01. RL00450-1-110518-17 от 11 мая 2018 г.
2.	Операционная система Microsoft Windows XP Professional Russian. Лицензия № 16698685 от 08.08.2003 г.
3.	Операционная система Microsoft Windows Professional 7 Russian. Лицензия №48497058 от 13.05.2011 г., договор № Пр/16/6 от 05 апреля 2016 г.
4.	Операционная система Microsoft Windows 10 Professional Russian. Контракт № ПР/ФЕН/15/18 от 23.10.2015 г., договор № Пр/16/6 от 05 апреля 2016 г.
5.	Программное обеспечение Microsoft Office Enterprise 2007 Russian. Лицензия №46138962 от 16.11.2009
6.	Программное обеспечение Microsoft Office 2013 Professional. Контракт № 405535 от 2 ноября 2015 года, контракт № ПР/ФЕН/15/18 от 23.10.2015 г.
7.	Программа для распознавания текста ABBYY FineReader 9.0 Corporate Edition. Лицензионный сертификат - код позиции AF90-3U1V25-102, ABBYY FineReader 9.0 Corporate Edition Volume License Concurrent от 28 июля 2009 г.
8.	Электронный словарь ABBYY Lingvo X3 Европейская версия - Код позиции AL14-2U1V05-102, ABBYY Lingvo x3 Европейская версия. Именная лицензия Concurrent от 28 июля 2009 г.
9.	Комплексная система антивирусной защиты Kaspersky Endpoint Security для бизнеса – стандартный Russian Edition. 500-999 Node 2 year Educational Renewal License. Лицензия № 13C8-190514-084943-783-1256 от 15.05.2019
10.	Файловый архиватор 7z. Свободно распространяемое ПО
11.	Браузеры Google Chrome, Mozilla, Opera. Свободно распространяемое ПО
12.	Текстовый редактор NotePad++. Свободно распространяемое ПО
13.	Инструмент для очистки и оптимизации операционных систем Microsoft Windows C Cleaner. Свободно распространяемое ПО
14.	Программа для записи видео и потокового вещания Open Broadcaster Software. Свободно распространяемое ПО
15.	Пакет офисных приложений Apache OpenOffice 4.1.6. Свободно распространяемое ПО
16.	Программа просмотра файлов формата RPD Adobe Acrobat Reader DC. Свободно распространяемое ПО
17.	Среда выполнения Adobe Flash Player. Свободно распространяемое ПО
18.	ПО интерактивной доски Elite Panaboard. Свободно распространяемое ПО

19.	Файловый менеджер Far manager. Свободно распространяемое ПО
20.	Система Интернет-телефонии Skype. Свободно распространяемое ПО
21.	Система облачного хранилища Dropbox. Свободно распространяемое ПО
22.	Редактор диаграмм, схем, блок-схем, UML-схем Dia 0.97.2. Свободно распространяемое ПО
6.3.2 Перечень информационных справочных систем и профессиональных баз данных	

7. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)			
Ауд.	Назначение	Оборудование и технические средства обучения	Вид
2-41	Компьютерный класс	доска учебная, компьютеры, столы компьютерные	
2-50	Лекционная с мультимедийным комплексом	акустическая система, доска учебная, источник бесперебойного питания, ноутбук, проектор, рулонный настенный экран, стол преподавателя, столы учебные, стул преподавателя	

8. МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ ДЛЯ ОБУЧАЮЩИХСЯ ПО ОСВОЕНИЮ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)	
<p>Лекции, читаемые преподавателем, являются основным ориентиром при изучении дисциплины. Методической основой освоения курса является рабочая программа по дисциплине, основные разделы которой следует получить на сайте университета в сети интернет в системе «Электронное обучение» (MOODLE) и использовать для подготовки к практическим занятиям и к зачету. Студенту необходимо вести конспекты, в которых необходимо отражать основные понятия, не только на основе лекций, но и на основе работы с основной, дополнительной литературой и интернет-источниками, выполнять задания для самостоятельной работы, предложенные преподавателем, а также проводить подготовку к проверочным работам по дисциплине.</p>	