

Наименование дисциплины: Б1.В.ОД.4 «Метрология анализа вещества»

Направление подготовки: 04.06.01 «Химические науки»

Направленность: 02.00.02 «Аналитическая химия»

Квалификация выпускника – «Исследователь. Преподаватель-исследователь»

Цели и задачи изучения дисциплины

Цель: формирование фундаментальных знаний и навыков применения математических и статистических методов обработки химических данных, в том числе большого объема и сложной структуры, для извлечения скрытой информации в задачах анализа многокомпонентных систем и распознавания образов химических объектов с использованием компьютерных программ для решения практических задач в области аналитической химии природных и техногенных объектов.

Задачи: овладение фундаментальными основами теории вероятности, прикладной статистики числовых и нечисловых объектов и теории принятия решений; обучение аспирантов математическим и статистическим методам обработки химических данных; выработка понимания возможностей этих методов применительно к процессу химического анализа в целом и к конкретным данным; овладение компьютерными программами обработки данных; ознакомление аспирантов с российскими и международными достижениями в области метрологии и компьютерной обработки информации, получаемой с помощью химических, физико-химических, физических и гибридных методов анализа вещества; формирование у аспирантов навыков использования теории принятия решений с целью выбора методов и методик обработки химической информации при реализации научно-практических задач по теме диссертационного исследования и оценки достоверности результатов, полученных самостоятельно или коллективом исследователей; формирование у аспирантов навыков преподавания дисциплины «Метрология анализа вещества».

Требования к результатам освоения дисциплины

Универсальные компетенции:	
УК-1	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-2	способность проектировать и осуществлять комплексные исследования, в том числе междисциплинарные, на основе целостного системного научного мировоззрения с использованием знаний в области истории и философии науки
УК-3	готовность участвовать в работе российских и международных исследовательских коллективов по решению научных и научно-образовательных задач
УК-4	готовность использовать современные методы и технологии научной коммуникации на государственном и иностранном языках
УК-5	способность планировать и решать задачи собственного профессионального и личностного развития
Общепрофессиональные компетенции:	
ОПК-1	способность самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность в соответствующей профессиональной области с использованием современных методов исследования и информационно-коммуникационных технологий
ОПК-2	готовностью организовать работу исследовательского коллектива в области химии и смежных наук
ОПК-3	готовность к преподавательской деятельности по основным образовательным программам высшего образования
Профессиональные компетенции:	
ПК-1	способность использовать знания основ теории фундаментальных разделов химии и

	роли аналитической химии в решении проблем наук о Земле и жизни; понимание возможностей и ограничений современных аналитических методов
ПК-2	способность собирать и анализировать научную литературу с целью выбора направления исследования; самостоятельно определять перечень необходимых инструментальных методов исследования и составлять план исследования в рамках выбранного направления подготовки
ПК-3	владение навыками химического анализа промышленных и природных объектов; обработки экспериментальных данных с использованием современных специализированных вычислительных комплексов и баз данных
ПК-4	способность представлять полученные в исследованиях результаты в виде отчетов и научных публикаций, профессионально участвовать в научных дискуссиях, выстраивать логику рассуждений и формулировать обоснованные заключения
ПК-5	способность преподавать химические науки в учреждениях высшего профессионального образования на основе полученного фундаментального образования и научного мировоззрения

Объем дисциплины и виды учебной работы

Вид учебной работы	Трудоемкость, уч. часов	
	Всего	Семестр №2
Общая трудоемкость дисциплины	72	72
Аудиторные занятия, в том числе:	20	20
лекции	10	10
практические (лабораторные) / семинарские занятия	10	10
Самостоятельная работа	52	52
Вид промежуточной аттестации (итогового контроля по дисциплине)	Зачет	Зачет

Содержание дисциплины

1. Основы метрологии. Метрология анализа вещества: теоретическая, прикладная и законодательная. Основные понятия метрологии. Специфика измерений в химическом анализе.
2. Связь метрологии с теорией вероятности и математической статистикой.
3. Теория информации и схема аналитического процесса.
4. Аналитический сигнал. Обработка сигналов: цифровая фильтрация, преобразование данных. Предварительная обработка данных. Разрешение аналитических сигналов.
5. Регрессионный анализ. Построение градуировочных зависимостей в химическом анализе. Нахождение содержания вещества по градуировочной зависимости.
6. Оценивание предела обнаружения, нижняя и верхняя границы определяемых содержаний, их статистическая оценка.
7. Статистические тесты и критерии проверки гипотез.
8. Применение стандартных образцов для градуирования и валидации аналитических методик.
9. Природа и типы погрешностей результатов анализа.
10. Компьютеризация аналитических методов и программное обеспечение.
11. Методы многомерного статистического анализа в аналитической химии
12. Управление качеством аналитических работ: прикладная и законодательная метрология в анализе вещества.

Разработчики: старший научный сотрудник лаб. 25.1 д.ф.-м.н. Шабанова Е.В., главный научный сотрудник лаб. 25.1 д.т.н., ст. науч.сотр. Васильева И.Е.