

**Компьютеризация лабораторного практикума по аналитической химии**

Студент 9 гр. 3 к. ф-та ХТиТ Лубяко В.М.

Научный руководитель – Болвако А.К.

Белорусский государственный технологический университет  
г. Минск

В рамках лабораторного практикума по физико-химическим методам анализа студенты химико-технологических специальностей Белорусского государственного технологического университета изучают следующие методы: кондуктометрия, потенциометрия, вольтамперометрия, фотоколориметрия, спектрофотометрия, турбидиметрия, нефелометрия, эмиссионная фотометрия пламени, рефрактометрия, газожидкостная хроматография, ионный обмен и экстракция. Для обработки результатов лабораторных работ по этим разделам нами было разработано программное обеспечение (ПО), позволяющее осуществлять обработку экспериментальных данных и формировать отчеты о выполненных работах. Разработанное ПО включает в себя следующие основные возможности:

- построение одного или нескольких градуировочных графиков методом наименьших квадратов с оценкой достоверности аппроксимации и расчет результатов анализа с использованием градуировочного графика, включая проверку значимости коэффициентов уравнения с помощью  $t$ -критерия Стьюдента при различном уровне доверительной вероятности;
- расчет погрешностей градуировочного графика;
- расчет статистических параметров для набора экспериментальных данных: среднее, среднее и стандартное отклонение, дисперсия, доверительный интервал для разного уровня доверительной вероятности и др.;
- отсеивание грубых промахов с помощью  $Q$ -теста;
- построение интегральных и дифференциальных кривых титрования (рисунок);
- оптимизация условий спектрофотометрического анализа бинарных смесей по методу Фирордта;
- оценка неопределенности аналитических определений на основе встроенного каталога химико-аналитического оборудования;
- матрицу для планирования эксперимента и выявления главных эффектов с помощью дробного факторного плана Плаккетта-Бермана;
- оптимизация условий проведения анализа методом Бокса (крутого восхождения);
- формирование протоколов отчетов о выполненной работе с указанием даты, времени и фамилии исполнителя;
- сохранение результатов в базе данных.

Выбор задач, решаемых с помощью разработанного приложения, обусловлен конкретным наполнением лабораторного практикума по физико-химическим методам анализа, и, как правило, не включает возможности, которые не используются при изучении курса. Это позволило получить простой, понятный и удобный интерфейс приложения и в то

же время охватить практически все типы численных вычислений и графических построений, которые осуществляются при проведении анализа в рамках практикума.

В разработанном ПО предусмотрена возможность сохранять полученные экспериментальные данные и результаты их обработки (градуировочные графики, статистические параметры для набора экспериментальных данных, кривые титрования, спектры и др.) в базе данных с возможностью их последующей загрузки для работы.

Разработанное ПО внедрено в учебный процесс кафедры аналитической химии и в настоящее время студенты химико-технологических специальностей используют его при прохождении лабораторного практикума.