

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДОВ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ СТАТИСТИКИ ПРИ ИЗМЕРЕНИИ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ВЕЩЕСТВ

Осипов Р.А., Скрябина А.Ю., Рукк Н.С.

Московская государственная академия тонкой химической технологии
им. М.В. Ломоносова (МИТХТ), каф. неорганической химии,
Россия, 119571, г. Москва, пр-т Вернадского, 86
Тел.: (495)9368912, факс: (495)4348711,
E-mail r.a.osipov@gmail.com

В работе рассмотрен общий подход к обработке результатов измерений физико-химических свойств веществ на примере иодидов гексаантинилантаноидов $[Ln(AP)_6]I_3$ ($Ln = La, Ce-Nd, Sm-Lu, Sc, Y$; АП — антипирин). Комплексные соединения были получены из водных растворов при взаимодействии предварительно полученных кристаллогидратов иодидов лантаноидов со стехиометрическим количеством антипирина. Состав соединений был подтвержден химическим анализом, а их индивидуальность — с помощью методов РФА и РСА.

В качестве измеряемого свойства была выбрана температура плавления T_m , измеренная с помощью прибора ПТП(М). Результаты каждого из экспериментов были проверены на наличие грубых ошибок (с помощью критериев 3σ и Романовского), которые, в случае их нахождения, исключались из обрабатываемых данных. Для каждого эксперимента был дан набор основных статистик и некоторых дополнительных численных характеристик выборки (выборочное среднее значение \bar{X} , выборочная дисперсия S_x^2 , выборочное среднее квадратичное отклонение S_x , доверительный интервал, относительная случайная ошибка Δ_r , относительная систематическая ошибка $\Delta_{0,r}$, оценка точности измерения \bar{T} , коэффициент вариации V , воспроизводимость S_r). Далее определялось необходимое количество добавочных измерений при заданном уровне точности и вариации, причем для облегчения и ускорения статистической обработки результатов эксперимента была разработана специальная расчетная таблица в программе MS Excel 2002 и написано руководство по ее эксплуатации. Было предсказано значение температуры плавления комплекса тербия (с помощью интерполяции и анализа аналогичных температурных рядов), а также выявлены закономерности в изменении температур плавления соединений как в ПБ группе, так и по ряду лантаноидов.

Литература

1. Протасов К. В. Статистический анализ экспериментальных данных – Мир, 2005.
142 стр.