دانشکده‌ی علوم

پایان نامه کارشناسی ارشد در رشته شیمی تجزیه

# آنالیز چند متغیره تصاویر کروماتوگرافی لایه نازک جهت اندازه گیری همزمانی ترکیبات با سرعت شویش یکسان

# و

# توصیف ترکیبات کربوکسیل با آنالیز چند متغیره طیف مادون قرمز

به وسیله ی:

نبی اله مبارکی

استاد راهنما:

دکتر بهرام همتی نژاد

شهریور ۱۳۸۸

**به نام خدا**

# اظهارنامه

اینجانب نبی اله مبارکی (۸۵۴۰۳۱) دانشجوی رشته ی شیمی گرایش تجزیه دانشکده ی علوم اظهار می کنم که این پایان نامه حاصل پژوهش خودم بوده و در جاهایی که از منابع دیگران استفاده کرده ام، نشانی دقیق و مشخصات کامل آن را نوشته ام . همچنین اظهارمی کنم که تحقیق و موضوع پایان نامه ام تکراری نیست و تعهد می نمایم که بدون مجوز دانشگاه دستاوردهای آن را منتشر ننموده و یا در اختیار غیر قرار ندهم .کلیه حقوق این اثر مطابق با آیین نامه مالکیت فکری و معنوی متعلق به دانشگاه شیراز است.

نام ونام خانوادگی: نبی اله مبارکی

تاریخ و امضا: ۱۳۸۸/۹/۱۷

**به نام خدا**

# آنالیز چند متغیره تصاویر کروماتوگرافی لایه نازک جهت اندازه گیری همزمانی ترکیبات با سرعت شویش یکسان

**و**

# توصیف ترکیبات کربوکسیل با آنالیز چند متغیره طیف مادون قرمز


**به وسیله ی :**

**نبی اله مبارکی**


**پایان نامه**

**ارائه شده به تحصیلات تکمیلی دانشگاه شیراز به عنوان بخشی از فعالیتهای تحصیلی لازم برای اخذ درجه کارشناسی ارشد**

**در رشته ی:**

**شیمی تجزیه**


**از دانشگاه شیراز**

**شیراز**

**جمهوری اسلامی ایران**


**ارزیابی و تصویب شده توسط کمیته ی پایا ن نامه با درجه ی: عالی**

دکتر بهرام همتی نژاد، دانشیار بخش شیمی (استاد راهنما و رئیس کمیته) .....

دکتر افسانه صفوی، استاد بخش شیمی .....

دکتر مرتضی آخوند، دانشیار بخش شیمی .....

دکتر علی خلفی نژاد، استاد بخش شیمی .....

**شهریور ۱۳۸۸**

تقدیم به :

مادر و پدرم

خانواده عزیزم

و همه کسانی که به من

آرامش را هدیه دادند

# سپاسگزاری

## و خدا هست...
## او جانشین تمام نداشته هاي من است

منت خدای را عزوجل که طاعتش موجب قربت است وبه شکر اندرش مزید نعمت هر نفسی که فرو میرود ممد حیات است و چون بر می آید مفرح ذات، پس در هر نفس دو نعمت موجود است و بر هر نعمت شکری واجب.

تشکر می کنم از استاد بزگوار و عزیزم جناب آقای دکتر بهرام همتی نژاد که با راهنمایی های ارزشمند خود در انجام هر چه بهتر این پژوهش مرا یاری کردند.

سپاسگذاری می کنم از اساتید عزیزم سرکار خانم افسانه صفوی، جناب آقای دکتر آخوند و جناب آقای دکتر خلفی نژاد که به عنوان اساتید مشاورم در تصحیح این رساله مرا یاری کردند.

سپاسگذاری صمیمانه دارم از دوستان عزیزم که در این مدت نهایت همکاری و همراهی صمیمانه را با من داشتند.

در نهایت تشکر ویژه دارم از خانواده ی عزیزم که همواره مشوق اصلی من در تمام دوران تحصیلم بوده اند.

چکیده

# آنالیز چند متغیره تصاویر کروماتوگرافی لایه نازک جهت اندازه گیری همزمانی ترکیبات با سرعت شویش یکسان

و

# توصیف ترکیبات کربوکسیل با آنالیز چند متغیره طیف مادون قرمز

به کوشش

نبی اله مبارکی

این تحقیق با استفاده آنالیز چند متغیره بر روی عکس های ذخیره شده بوسیله یک دوربین دیجیتال راه حلی را برای مسئله همپوشانی پیک ها که یکی از مسائل مهم در کروماتوگرافی لایه نازک است ارائه میدهد. ما برای اولین بار اندازه گیری همزمان چند گونه بر روی کاغذ کروماتوگرافی لایه نازک را با استفاده از آنالیز چند متغیره عکس مورد مطالعه قرار دادیم.

سیستم عکسبرداری متشکل از یک کابینت، یک دوربین دیجیتال و یک برنامه آنالیز چند متغیره است که جهت ذخیره کردن عکسهای گرفته شده از کروماتوگرافی لایه نازک پس از حرکت محلولهای حاوی چند گونه بر روی این کاغذها تهیه شده است. سپس این عکسها به عنوان ورودی به partial least square داده می شوند برای انجام دادن کالیبراسیون چند متغیره.

با به کار بردن استراتژی مختلف مانند استفاده از principal component analysis و انتخاب متغیر، مدلی به دست آمد که توانایی تخمین غلظتهای مربوط به شناساگرهای موجود در دسته پیش بینی خارجی را با خطای نسبی کمتر از ۱۰٪ و در اغلب موارد کمتر از ۵٪ را دارا می باشد.

در قسمت دوم با استفاده از برنامه نوشته شده در محیط MATLAB نمودارهای طیف های Infrared (IR) گونه های مختلفی از جمله اسیدها، آلدهیدها، استرها و کتونها که به صورت عکس هستند هر کدام به ماتریسی با دو ستون که نمایانگر مختصات X و Y گونه موردنظر است تبدیل میشود.

سپس با استفاده از روش Principal Component Analysis (PCA) و رسم Principal Component (PC) های آن بر حسب یکدیگر و استفاده از روش Extended Canonical Variates Analysis (ECVA) ورسم Extended Canonical Variate (ECV) های آن بر حسب یکدیگر مشاهده شد که روش ECVA توانایی بیشتری در جدا کردن کلاسها از یکدیگر دارد.

همچنین درصد وزنی عناصری مانند Carbon (C)، Hydrogen (H)، Oxygen (O) در هر کدام از گونه ها و Molecular Weight (M.W.) هر گونه را با روش Partial Least Square (PLS) محاسبه شد که مشاهده شد که با تقریب نسبتا قابل قبولی این موارد به دست می آیند.

فهرست مطالب

عنوان صفحه


فصل يك ..... ١

مقدمه ..... ٢

١-١-شيمي سنجي ..... ٢
١-١-١-مزاياي روشهاي كمومتريكس ..... ٦
١-١-٢-شناسايي الگوها ..... ٦
١-١-٣-طبقه بندي الگوها ..... ٦
١-٢-روشهاي شناسايي الگو ..... ٧
١-٢-١-شناسايي الگو بدون ناظر ..... ٧
١-٢-٢-شناسايي الگو با ناظر ..... ٧
١-٣-تحليل اجزا اصلي ..... ٨
١-٤-تغييرات انااليز متعارف ..... ٩

فصل دوم ..... ١٠

بررسي مقالات ..... ١٠

٢-١-هدف از اين كار ..... ١١

فصل سوم ..... ١٢

آزمايشات ..... ١٢

٣-١-آناليز چند متغيره تصاوير كروماتوگرافي لايه نازك جهت اندازه گيري همزماني تركيبات با سرعت شويش يكسان ..... ١٣
٣-١-١-واكنشگرها ..... ١٣
٣-١-٢-مراحل اندازه گيري همزماني چند آناليت با استفاده از TLC-MIA ..... ١٥
٣-١-٣-برنامه MIA ..... ١٨
٣-٢-توصيف تركيبات كربوكسيل با آناليز چند متغيره طيف مادون قرمز ..... ٢٥
٣-٢-١-مجموعه هاي داده ها ..... ٤١

فصل چهارم ..... ٥١

بحث و نتيجه گيري ..... ٥١

٤-١-آناليز چند متغيره تصاوير كروماتوگرافي لايه نازك جهت اندازه گيري همزماني تركيبات با سرعت شويش يكسان ..... ٥٢
٤-٢-توصيف تركيبات كربوكسيل با آناليز چند متغيره طيف مادون قرمز ..... ٦٧
٤-٢-١-كلاس بندي تركيبات كربونيل ..... ٧٢
٤-٢-٢-توصيف ساختاري تركيبات كربونيل ..... ٨١

نتيجه گيري: ..... ١٠٠

فهرست جدول ها

عنوان و شماره صفحه

**جدول ۳-۱** ترکیب دسته کالیبراسیون ..... ۱۷
**جدول ۳-۲** ترکیب دسته پیش بیني ..... ۱۷
**جدول ۳-۳** اسامي ترکیباتي که از اینترنت دانلود شده اند و خصوصیات آنها از قبیل نوع طیف و مقدار واقعي وزن ملکولي و درصد وزني عناصر آنها، الف) اسیدها ب)آلدهیدها ج)استرها د)کتونها ..... ۴۱
**جدول ۴-۱** شاخصهاي تجزیه اي براي کالیبراسیون تك متغیره هر کدام از آنالیتها ..... ۵۸
**جدول ۴-۲** خطاهاي مربع میانگین ریشه ها (Root mean square error) مربوط به CV و کالیبراسیون (واحدي از $10^{-7}$ گرم) و تعداد متغیرهاي پنهان (LV) بهینه در PLS که در اندازه گیري همزماني شناساگرها با استفاده از روشهاي باز کردن متفاوت در کار با کل داده ها به دست آمده است (روشهاي TR). ..... ۶۲
**جدول ۴-۳** خطاي پیش بیني نسبي مربوط به دسته پیش بیني که با آنالیز PLS بر روي کل محدوده داده ها به دست آمده اند. ..... ۶۳
**جدول ۴-۴** خطاهاي مربع میانگین ریشه ها (Root mean square error) مربوط به CV و کالیبراسیون (واحدي از $10^{-7}$ گرم) و تعداد متغیرهاي پنهان (LV) بهینه در PLS که در اندازه گیري همزماني شناساگرها با استفاده از روشهاي باز کردن متفاوت در کار با داده هاي حاصل از انتخاب متغیر به دست آمده است (روشهاي SV). ..... ۶۵
**جدول ۴-۵** خطاي پیش بیني نسبي مربوط به دسته پیش بیني که با آنالیز PLS بر روي داده هاي حاصل از انتخاب متغیر به دست آمده اند. ..... ۶۶
**جدول ۴-۶** نتایج PCA بر روي ماتریس اعداد جذب مربوط به طیفهاي IR ..... ۷۲
**جدول ۴-۷** ملکولهایي که به عنوان دسته پیش بیني استفاده شده اند. ..... ۸۲
**جدول ۴-۸** R2, Q2, Mean relative error, root mean square error و PRESS مربوط به CV و کالیبراسیون و تعداد متغیرهاي پنهان (LV) بهینه در PLS که براي پیش بیني خصوصیات ساختاري کل گونه ها به دست آمده است ..... ۸۳

**جدول ۴-۹** R2, Q2, Mean relative error, root mean square error و PRESS مربوط به CV و کالیبراسیون و تعداد متغیرهاي پنهان (LV) بهینه در PLS که براي پیش بینـي خصوصیات ساختاري اسیدها به دست آمده است..... ۸۵
**جدول ۴-۱۰** R2, Q2, Mean relative error, root mean square error و PRESS مربوط به CV و کالیبراسیون و تعداد متغیرهاي پنهان (LV) بهینه در PLS که براي پیش بینـي خصوصیات ساختاري آلدهیدها به دست آمده است..... ۸۷
**جدول ۴-۱۱** R2, Q2, Mean relative error, root mean square error و PRESS مربوط به CV و کالیبراسیون و تعداد متغیرهاي پنهان (LV) بهینه در PLS که براي پیش بینـي خصوصیات ساختاري استرها به دست آمده است..... ۸۸
**جدول ۴-۱۲** R2, Q2, Mean relative error, root mean square error و PRESS مربوط به CV و کالیبراسیون و تعداد متغیرهاي پنهان (LV) بهینه در PLS که براي پیش بینـي خصوصیات ساختاري کتونها به دست آمده است..... ۹۰

فهرست شکل ها

عنوان صفحه

**شکل ۱-۱** چگونگي ارتباط كمومتريكس با بقيه رشته ها ..... ۵
**شکل ۳-۱** وسيله طراحي شده براي قرار دادن لكه ها بر روي يك خط افقي ..... ۱۴
**شکل ۳-۲** نمودار شمايي از سيستم MIA تهيه شده. در سمت چپ شكل سطح مقطعي از كابينت ساخته شده آورده شده است..... ۱۵
**شکل ۳-۳** مراحلي كه در اندازه گيري همزماني شناساگرها در مخلوطشان با استفاده از روش TLC-MIA به كار مي رود..... ۱۶
**شکل ۳-۴** نمايش تصويري روشهايي كه براي باز كردن ماتريس داده هاي شدت رنگ پيكسلها يا ماتريسهاي score آنها استفاده مي شود. الف) باز شدن ساده (SU); ب) جمع ستونها (SR) و ج) جمع ستونها (SC)..... ۲۱
**شکل ۳-۵** مراحل به دست آمدن داده هاي مرتبه اول از داده هاي اوليه ..... ۲۴
**شکل ۳-۶** محيط كار MATLAB ..... ۲۵
**شکل ۳-۷** پنجره اصلي نرم افزار ir_gui1..... ۲۶
**شکل ۳-۸** وارد كردن طيف IR با فرمت GIF ..... ۲۷
**شکل ۳-۹** پس از وارد كردن طيف IR برنامه آن را نشان مي دهد. ..... ۲۷
**شکل ۳-۱۰** حالتهاي انتخاب محور توسط برنامه ..... ۲۸
**شکل ۳-۱۱** انتخاب دستي محدوده هاي محورهاي نمودار ..... ۲۹
**شکل ۳-۱۲** طيف به دست آمده با محدوده هاي تعريف شده محورهاي X و Y ..... ۳۰
**شکل ۳-۱۳** تعريف مشخصات تصوير به نرم افزار ir_gui1..... ۳۰
**شکل ۳-۱۴** مشخص كردن نحوه چرخش طيف نسبت به محور افق ..... ۳۱
**شکل ۳-۱۵** تعريف مشخصات محورهاي X و Y..... ۳۲
**شکل ۳-۱۶** يكسان نبودن مقياس در محور X ..... ۳۳
**شکل ۳-۱۷** تعريف مشخصات طيف خروجي..... ۳۴
**شکل ۳-۱۸** نمايش طيفي كه توسط برنامه ir_gui1 به عدد تبديل شده است. ..... ۳۵
**شکل ۳-۱۹** معكوس كردن محور X يا Y..... ۳۶

**شكل ۳-۲۰** خروجي دستور "visualize figure and spectrum" ..... ۳۷
**شكل ۳-۲۱** خارج كردن طيفي كه به عدد تبديل شده از محيط برنامه ir_gui1..... ۳۸
**شكل ۳-۲۲** هموارسازي طيف خروجي ..... ۳۹
**شكل ۳-۲۳** اعداد مربوط به طيف عددي شده نهايي كه قابليت خواندن اين اعداد توسط بقيه نرم افزارها نيز وجود دارد. ..... ۴۰
**شكل ۴-۱** كروماتوگرام سه بعدي از الف) پس زمينه ب) آناليتهاي خالص و مخلوطشان بعد از حركت لكه ها بر روي كاغذ، بدون كم كردن پس زمينه ج)پس از كم كردن پس زمينه ..... ۵۴
**شكل ۴-۲** كروماتوگرامهاي دو بعدي شناساگرها و مخلوطهاي آنها. غلظتهاي اين شناساگرها همانند شكل ۴.۱ است. ..... ۵۵
**شكل ۴-۳** ساختمان شيميايي شناساگرها استفاده شده در اين كار. ..... ۵۶
**شكل ۴-۴** كروماتوگرامهاي به دست آمده جهت چك كردن تكرارپذيري، كه در آن ۸ بار كرزول قرمز بر روي كاغذ تزريق شده است. ..... ۵۷
**شكل ۴-۵** عكسهاي دو بعدي از كاغذهاي TLC مربوط به دسته هاي كالیبراسیون و پيش بيني پس از حركت كردن لكه ها بر روي اين كاغذها قبل از تصحيح بوسيله استاندارد دروني..... ۵۹
**شكل ۴-۶** عكسهاي دو بعدي از كاغذهاي TLC مربوط به دسته هاي كالیبراسیون و پيش بيني پس از حركت كردن لكه ها بر روي اين كاغذهاو پس از تصحيح بوسيله استاندارد دروني..... ۶۰
**شكل ۴-۷** عكسهاي دو بعدي از كاغذهاي TLC مربوط به دسته هاي كالیبراسیون و پيش بيني پس از حركت كردن لكه ها بر روي اين كاغذها و پس از حذف قسمتهاي زائد..... ۶۱
**شكل ۴-۸** الف) طيف IR مربوط به ۳و۵ دي كلرو ساليسيك اسيد كه از اينترنت دانلود شده ب) طيف عددي معادل كه توسط برنامه ir_gui1 به دست آمده ..... ۶۸
**شكل ۴-۹** الف) طيف IR مربوط به ترانس، ترانس ۲و۴ هگزا ديانال كه از اينترنت دانلود شده ب) طيف عددي معادل كه توسط برنامه ir_gui1 به دست آمده ..... ۶۹
**شكل ۴-۱۰** الف) طيف IR مربوط به اتيل پنتا دكانوات كه از اينترنت دانلود شده ب) طيف عددي معادل كه توسط برنامه ir_gui1 به دست آمده ..... ۷۰
**شكل ۴-۱۱** الف) طيف IR مربوط به ۵ متيل ۳ هگزانون كه از اينترنت دانلود شده ب) طيف عددي معادل كه توسط برنامه ir_gui1 به دست آمده ..... ۷۱
**شكل ۴-۱۲** رسم سه PC اول كه از اعداد طيفهاي IR مربوط به تركيبات كربونيل مورد مطالعه به دست آمده در ۴ نماي مختلف (گروههاي عاملي اسيد، آلدهيد، استر و كتون به ترتيب با *، +، . و o مشخص شده اند). ..... ۷۳

**شكل ۴-۱۳** رسم سه CV اول كه از اعداد طيفهاي IR مربوط به تركيبات كربونيل مورد مطالعه به دست آمده در ۴ نماي مختلف (گروههاي عاملي اسيد، آلدهيد، استر و كتون بـه ترتيـب بـا *، +، . و o مشخص شده اند). ..... ۷۷

**شكل ٤-١٤** رسم مقدارهاي پيش بيني شده با PLS بر حسب مقدارهاي واقعي براي C% در تركيبات كربونيل مورد استفاده در اين مطالعه: A) اسيدها، L) آلدهيدها، E) استرها، K) كتونها. اعداد ۱-۵ سمت راست، نشان دهنده روش آزمايشگاهي براي ثبت طيف IR است. كه به ترتيب شامل كل روشها، liquid film، KBr disk، محلول CCl4 و nujol mull هستند. نمونه هاي كاليبراسيون با دايره هاي تو خالي و نمونه هاي پيش بيني با دايره هاي تو پر نشان داده شده اند..... ۹۲

**شكل ٤-١٥** رسم مقدارهاي پيش بيني شده با PLS بر حسب مقدارهاي واقعي براي H% در تركيبات كربونيل مورد استفاده در اين مطالعه: A) اسيدها، L) آلدهيدها، E) استرها، K) كتونها. اعداد ۱-۵ سمت راست، نشان دهنده روش آزمايشگاهي براي ثبت طيف IR است. كه به ترتيب شامل كل روشها، liquid film، KBr disk، محلول CCl4 و nujol mull هستند. نمونه هاي كاليبراسيون با دايره هاي تو خالي و نمونه هاي پيش بيني با دايره هاي تو پر نشان داده شده اند..... ۹٤

**شكل ٤-١٦** رسم مقدارهاي پيش بيني شده با PLS بر حسب مقدارهاي واقعي براي O% در تركيبات كربونيل مورد استفاده در اين مطالعه: A) اسيدها، L) آلدهيدها، E) استرها، K) كتونها. اعداد ۱-۵ سمت راست، نشان دهنده روش آزمايشگاهي براي ثبت طيف IR است. كه به ترتيب شامل كل روشها، liquid film، KBr disk، محلول CCl4 و nujol mull هستند. نمونه هاي كاليبراسيون با دايره هاي تو خالي و نمونه هاي پيش بيني با دايره هاي تو پر نشان داده شده اند..... ۹٦

**شكل ٤-١٧** رسم مقدارهاي پيش بيني شده با PLS بر حسب مقدارهاي واقعي براي وزن ملكولي در تركيبات كربونيل مورد استفاده در اين مطالعه: A) اسيدها، L) آلدهيدها، E) استرها، K) كتونها. اعداد ۱-۵ سمت راست، نشان دهنده روش آزمايشگاهي براي ثبت طيف IR است. كه به ترتيب شامل كل روشها، liquid film، KBr disk، محلول CCl4 و nujol mull هستند. نمونه هاي كاليبراسيون با دايره هاي تو خالي و نمونه هاي پيش بيني با دايره هاي تو پر نشان داده شده اند..... ۹۸

# فصل یک

## مقدمه

# مقدمه

## ۱-۱-شیمی سنجی

از زمان آغاز شیمی سنجی در سال ۱۹۷۲ تا کنون تعاریف مختلفی از آن در نوشته های مربوط به شیمی عنوان شده است که در زیر به بخشی از آنها اشاره می شود:

• ″ شیمی سنجی به عنوان کاربرد روشهای ریاضی و آمار در اندازه گیریهای شیمی تعریف می شود.″

• ″ شیمی سنجی یک دستورالعمل شیمی است که در آن از روشهای ریاضی و آمار برای به دست آوردن راه بهینه برای کسب اطلاعات شیمیایی در مواد شیمیایی استفاده می شود.″

• ″ پیشرفت های شیمی سنجی و درک این پیشرفت هایی که توسط نرم افزار کامپیوتری تحقق یافته به معنی تبدیل داده های خام به اطلاعات، اطلاعات به دانش و دانش به بینش است.″

• ″ تحقیقات در شیمی سنجی کمک می کند به طراحی انواع جدیدی از ابزار، تولید آزمایشهای بهینه ای با حداکثر اطلاعات مفید و فهرست کردن و حل مسائل مربوط به تفکیک سیگنال و کالیبراسیون. همه اینها با توجه به محدودیتهای دستگاه در تعیین داده های کمی و همچنین توانایی آن در کیفیت داده های تولید شده تعیین می شود.″

• ″ شیمی سنجی، کاربرد روشهای آماری و ریاضی در شیمی ...″

• ″ شیمی سنجی مانند روشهای دیگری که بر مبنای منطق ریاضی است یک دستورالعمل است که به کاربرد آمار و ریاضی در شیمی مربوط می شود.″

• ″ شیمی سنجی استفاده از روشهای ریاضی و آمار برای بررسی، تفسیر و پیش بینی داده های شیمیایی است.″

• ″ به طور کلی شیمی سنجی را می توان به عنوان کاربرد روشهای ریاضی و آمار در ۱) بهبود فرآیندهای اندازه گیری شیمی و ۲) استخراج اطلاعات مفید از داده های اندازه گیری شده شیمیایی و فیزیکی توصیف کرد.″

• ″ شیمی سنجی روشی در علوم اندازه گیری و تجزیه بر اساس ایده مشاهده غیرمستقیم است.اندازه گیریها مربوط است به ترکیب شیمیایی مواد انتخاب شده و مقدار مشخصه استنتاج شده مورد علاقه از بین بعضی از روابط ریاضی.″

• ″ شیمی سنجی یک دستورالعمل شیمی است که از ریاضیات، آمار و منطق صوری استفاده می کند

الف) برای طراحی یا انتخاب روش آزمایش بهینه

ب) برای تهیه حداکثر اطلاعات شیمیایی با آنالیز داده های شیمیایی

ج) برای به دست آوردن دانشی در مورد سیستمهای شیمیایی.″

• ″ تمام مراحل که بوسیله آن برای تصمیم گیری داده (مانند اعداد در جدول) به اطلاعات تبدیل می شود.″

• ″ شیمی سنجی مانند شیمی آلی یک موضوع واحد نیست. شیمی آلی بطور اساسی یک دانش بر مبنای اصول مهارتی معین و سپس افزایش دانش است. شیمی سنجی یک موضوع با مبنای مهارت بیشتر است اما نیاز به داشتن اطلاعات زیاد در مورد روشهای مورد استفاده ندارد و تنها نیاز به دانستن مقدار کمی از اصول است اما برای توانایی حل مسئله نیاز به داشتن تجربه است.″

• ″ گروههای مختلف پیش زمینه ها و انتظارات مختلفی دارند که شیمی سنجی باید چگونه معرفی شود:

آماریها مایلند که با توزیع و تستهای فرضیه و غیره شروع کنند و با استفاده از آن جلـو برونـد. آنها ناخرسند می شوند اگر از توصیف ریاضی استفاده نشود.

مهندسان شیمی دوست دارند که با جبرخطی مانند ماتریسها و بعضی اوقات از روشهای ریاضی شروع کنند، بنابراین علاقمند به توزیع و غیره هستند. مهندسان کامپیوتر معمولاً علاقمنـد بـه الگوریتمها هستند.

شیمیستهای تجزیه معمولاً مقدار کمی در مورد آمار می دانند امـا لزومـا نمـی خواهـد خیلـی مسلط به ریاضیات و الگوریتمها باشند، بنابراین مایلند که از طریق شیمی تجزیه آمـاری بـه آن برسند.

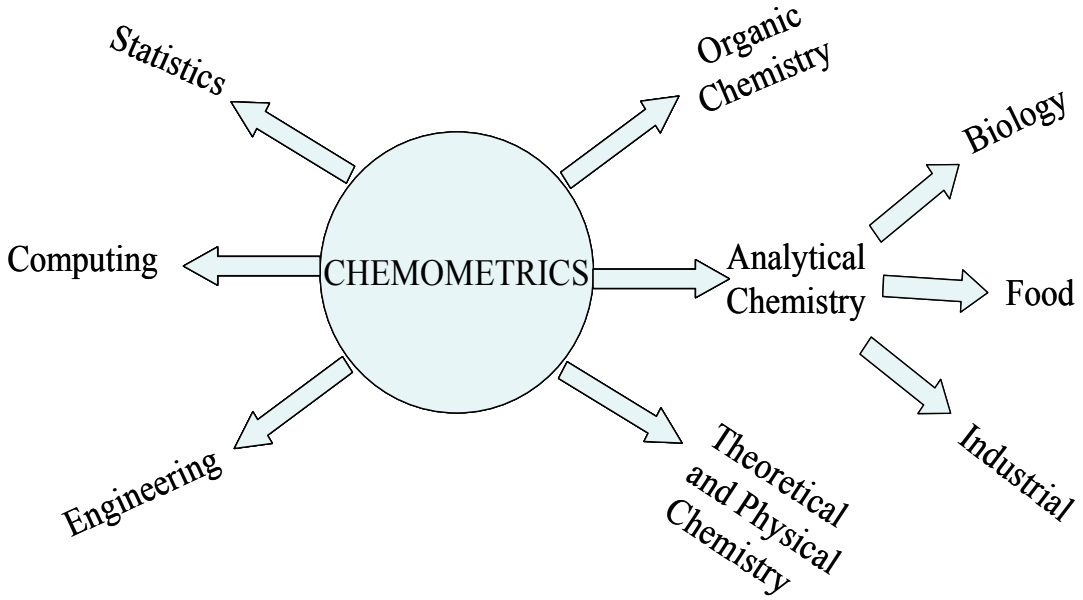
شیمیستهای آلی ریاضیات را دوست ندارند و مایلند بسته های با قابلیت کاراتوماتیـک را بـرای استفاده انتخاب کنند. آنها معمولاً به دوره های آموزشی سخت برای اجتنـاب از ماتریسـها نیـاز دارند. دوره آموزشی که برای یک شیمیست آلی خوب تلقی می شود برای یک آماری بد به نظر می رسد.

استفاده از کامپیوتر برای حل مشکلات شیمیایی در ۲۰ سال گذشته بطور قابل توجهی افزایش یافته است. کمومتریکس استفاده از روشهای ریاضی و آمار برای پـردازش، تفسـیر و پیشـگویی داده های شیمیایی است. متدولوژی های قوی چشم اندازهای جدیدی را برای شـیمیدانان بـاز کرد و راه حل های مفیدی برای بسیاری از مشکلات شیمیایی فراهم آورد.

رابطه بین کمومتریکس به رشته های دیگر درشکل ۱-۱ آورده شده است. آیا که نقش اصلی را در کمومتریکس ایفا می کند. مهندسان بویژه مهندسـان شـیمی دربسـیاری از زمینـه هـای کاریشان به کمومتریکس احتیاج دارند. در سمت راسـت شـاخه هـایی از شـیمی اسـت کـه از کمومتریکس استفاده می کنند. شیمی تجزیه بیشترین استفاده را از کمـومتریکس مـی کنـد. کمومتریکس نقش اساسی را شیمی تجزیه ایفا می کند. شیمیدانان محیط زیست، بیولوژیسـت ها، شیمیدانان غذایی که نیاز زیادی به اندازه گیریهای شیمی تجزیـه دارنـد و از تقریـب هـای چند متغیره استفاده می کنند، برای تفسیر داده هایشان به کمومتریکس نیاز دارند. شیمیدانان آلی نیاز نسبتاً متفاوتی به کمومتریکس دارد. عمدتاً در زمینه طراحی رابطه بـین کمـومتریکس

به رشته های دیگر درشکل ... آورده شده است. آیا که نقش اصلی را در کمومتریکس ایفا می کند. مهندسان بویژه مهندسان شیمی دربسیاری از زمینه های کاریشان به کمومتریکس احتیاج دارند. در سمت راست شاخه هایی از شیمی است که از کمومتریکس استفاده می کنند. شیمی تجزیه بیشترین استفاده را از کمومتریکس می کند. کمومتریکس نقش اساسی را شیمی تجزیه ایفا می کند. شیمیدانان محیط زیست، بیولوژیست ها، شیمیدانان غذایی که نیاز زیادی به اندازه گیریهای شیمی تجزیه دارند و از تقریب های چند متغیره استفاده می کنند، برای تفسیر داده هایشان به کمومتریکس نیاز دارند. شیمیدانان آلی نیاز نسبتاً متفاوتی به کمومتریکس دارد. عمدتاً در زمینه طراحی آزمایش ( مثلاً برای اپتیمم کردن شرایط آزمایش ) و QSAR برای طراحی داروها. در آخر شیمی فیزیک دانان مانند اسپکتروسکوپی دانان و سینتیک دانان اغلب به متدهایی برای جداسازی پیک ها و آنالیز داده های چند متغیره نیاز دارند.

در کمومتریکس نتیجه اصلی، ساختن یک رابطه ریاضی برای مشکل شیمیائی است. بنابراین کمومتریکس جدا از شیمی نیست.




**شکل ۱-۱** چگونگی ارتباط کمومتریکس با بقیه رشته ها