**Nazwa przedmiotu:**

Chemometria analityczna

**Koordynator przedmiotu:**

prof. nzw dr hab. inż. Katarzyna Pawlak

**Status przedmiotu:**

Obowiązkowy

**Poziom kształcenia:**

Studia II stopnia

**Program:**

Technologia Chemiczna

**Grupa przedmiotów:**

Obowiązkowe

**Kod przedmiotu:**

brak

**Semestr nominalny:**

2 / rok ak. 2020/2021

**Liczba punktów ECTS:**

5

**Liczba godzin pracy studenta związanych z osiągnięciem efektów uczenia się:**

godziny kontaktowe 50h, w tym:a) obecność na wykładach – 30h, b) obecność na laboratorium – 15h, c) prezentacja projektu 5h. Zapoznanie z literaturą i przygotowanie do zaliczenia dwóch kolokwiów – 30h, przygotowanie projektu – 30h, przygotowanie sprawozdań z laboratorium – 20 h. Razem: 125 h, co odpowiada 5 punktom ECTS.

**Liczba punktów ECTS na zajęciach wymagających bezpośredniego udziału nauczycieli akademickich:**

1. obecność na wykładach – 30h, 2. Obecność na laboratorium – 15h, 3. Omówienie i sprawdzenie zadań projektowych – 15 h. Razem 60h, co odpowiada 2 punktom ECTS

**Język prowadzenia zajęć:**

polski

**Liczba punktów ECTS, którą student uzyskuje w ramach zajęć o charakterze praktycznym:**

laboratorium – 15h, prezentacja i przygotowanie projektu 30h, przygotowanie sprawozdań z laboratorium – 20 h. Razem: 65 h, co odpowiada 2 punktom ECTS.

**Formy zajęć i ich wymiar w semestrze:**

|  |  |
| --- | --- |
| Wykład: | 30h |
| Ćwiczenia: | 0h |
| Laboratorium: | 15h |
| Projekt: | 15h |
| Lekcje komputerowe: | 0h |

**Wymagania wstępne:**

Zaliczenie przedmiotów - Chemia analityczna: wykład i laboratorium

**Limit liczby studentów:**

-

**Cel przedmiotu:**

Po ukończeniu kursu student powinien: • umieć zaprojektować postępowanie walidacyjne dla metody jakościowej, półilościowej i ilościowej, • umieć posługiwać się ogólnie dostępnym oprogramowaniem umożliwiającym opis statystyczny metody, • przygotować i wygłosić prezentację dla uczestników kursu na temat wybranych zagadnień związanych z walidacją metody analitycznej, której uzupełnieniem będzie krótka dyskusja z udziałem słuchaczy i prowadzącego.

**Treści kształcenia:**

Celem zajęć jest zapoznanie studentów z procedurami walidacji metody analitycznej oraz planowaniem eksperymentu prowadzącego do przeprowadzenia studium badawczego przy minimalnej ilości pomiarów. Studenci, na podstawie krótkich zadań problemowych i obliczeniowych (od strony praktycznego zastosowania) zapoznają się z zagadnieniami związanymi z: 1. walidacją metody analitycznej (określaniem: precyzji i dokładności wyniku, powtarzalności, odtwarzalności, elastyczności i odporności metody, granicy detekcji i oznaczalności, zakresu liniowości, selektywności i specyficzności, odzysku; korelacją otrzymanych wyników badań otrzymanych metodą walidowaną z wynikami otrzymanymi za pomocą uznanych metod odniesienia lub dla materiału referencyjnego); 2. analizą czynników wpływających na błąd pomiaru i metodami minimalizacji tych czynników; 3. sposobami wyznaczania / szacowania budżetu niepewności dla otrzymanego wyniku zasadami projektowania walidacji metody, określania kryteriów akceptacji oraz sporządzania raportu walidacyjnego. Kryteria oceny: Ocena na podstawie sumarycznej liczby punktów z opracowania 1) projektu walidacji metody analitycznej opisanej w literaturze anglojęzycznej i jego prezentacji oraz 2) zadania dotyczącego oszacowania budżetu niepewności prostej metody analitycznej.

**Metody oceny:**

Ocena na podstawie opracowania 1) projektu walidacji metody analitycznej i oszacowania budżetu niepewności, 2) kolokwium z zadań dotyczących opisu statystycznego danych i wybranych testów statystycznych, 3) laboratorium.

**Egzamin:**

nie

**Literatura:**

1.J. Arendarski, Niepewność pomiarów, OWPW, Warszawa, 2003, 2. J. Namieśnik, Ocena i kontrola jakości wyników pomiarów analitycznych, Wydawnictwo Naukowo-Techniczne, Warszawa, 2007.

**Witryna www przedmiotu:**

ch.pw.edu.pl

**Uwagi:**

## Charakterystyki przedmiotowe

### Profil ogólnoakademicki - wiedza

**Charakterystyka W01:**

Zna podstawowe pojęcia statystyczne stosowane do opisu metod analitycznych w celu ich walidacji i komercjalizacji

Weryfikacja:

kolokwium

**Powiązane charakterystyki kierunkowe:** K\_W01, K\_W14

**Powiązane charakterystyki obszarowe:**

**Charakterystyka W02:**

Ma wiedzę z zakresu stosowania technik i metod optycznej spektrometrii atomowej i cząsteczkowej do charakteryzowania składu materiałów, w tym oceny jakości produktów chemicznych;

Weryfikacja:

kolokwium

**Powiązane charakterystyki kierunkowe:** K\_W08, K\_W10

**Powiązane charakterystyki obszarowe:**

**Charakterystyka W03:**

Posiada podstawową wiedzę z zakresu numerycznej obróbki widm emisyjnych i absorpcyjnych, w tym znajomość pakietów oprogramowania przydatnych w obliczeniach chemometrycznych i różniczkowaniu widm

Weryfikacja:

kolokwium opracowanie raportów z wyników badań

**Powiązane charakterystyki kierunkowe:** K\_W01, K\_W10

**Powiązane charakterystyki obszarowe:**

**Charakterystyka W03:**

Posiada podstawową wiedzę z zakresu numerycznej obróbki widm emisyjnych i absorpcyjnych, w tym znajomość pakietów oprogramowania przydatnych w obliczeniach chemometrycznych i różniczkowaniu widm

Weryfikacja:

kolokwium opracowanie raportów z wyników badań

**Powiązane charakterystyki kierunkowe:** K\_W01, K\_W10

**Powiązane charakterystyki obszarowe:**

### Profil ogólnoakademicki - umiejętności

**Charakterystyka U01:**

Stosuje techniki optycznej spektrometrii atomowej i cząsteczkowej do ilościowego oznaczania składu materiałów

Weryfikacja:

opracowanie raportów z wyników badań

**Powiązane charakterystyki kierunkowe:** K\_U06, K\_U08

**Powiązane charakterystyki obszarowe:**

**Charakterystyka U02:**

Potrafi wykorzystać proste metody numeryczne i chemometryczne procedury analityczne do rozwiązywania problemów w zakresie charakterystyki składu chemicznego materiałów; Umie zastosować metody obliczeniowe do opisu dokładności i rzetelności metody analitycznej i wskazania etapów do poprawienia

Weryfikacja:

opracowanie raportów z wyników badań; zadania do rozwiązania

**Powiązane charakterystyki kierunkowe:** K\_U06, K\_U09

**Powiązane charakterystyki obszarowe:**

**Charakterystyka U03:**

Umie (w zespole) przygotować i wygłosić prezentację dotyczącą opisu statystycznego opracowanej metody

Weryfikacja:

Wygłoszenie prezentacji

**Powiązane charakterystyki kierunkowe:** K\_U02, K\_U03

**Powiązane charakterystyki obszarowe:**

**Charakterystyka U03:**

Umie (w zespole) przygotować i wygłosić prezentację dotyczącą opisu statystycznego opracowanej metody

Weryfikacja:

Wygłoszenie prezentacji

**Powiązane charakterystyki kierunkowe:** K\_U02, K\_U03

**Powiązane charakterystyki obszarowe:**

### Profil ogólnoakademicki - kompetencje społeczne

**Charakterystyka K01:**

Potrafi pracować w zespole, mając świadomość odpowiedzialności za prawidłowe wykonanie eksperymentów i interpretację uzyskanych wyników;

Weryfikacja:

wykonanie programu badań i opracowanie raportów z wyników badań

**Powiązane charakterystyki kierunkowe:** K\_K03

**Powiązane charakterystyki obszarowe:**

**Charakterystyka K02:**

Rozumie, że ze względu na rozwój nowych technik instrumentalnych, sposoby walidacji metod cały czas ulegają modyfikacji i że walidacji ma zapewniać dobrą jakość rozwiązań

Weryfikacja:

kolokwium

**Powiązane charakterystyki kierunkowe:** K\_K01, K\_K02, K\_K03

**Powiązane charakterystyki obszarowe:**