

Nazwa przedmiotu			Kod ECTS
Komputerowa analiza widm spektralnych			13.3.0684
Nazwa jednostki prowadzącej przedmiot			
Katedra Chemii i Radiochemii Środowiska			
Studia			
wydział	kierunek	poziom	drugiego stopnia
Wydział Chemii	Chemia	forma	stacjonarne
		moduł	wszystkie
		specjalnościowy	wszystkie
specjalizacja	wszystkie		
Nazwisko osoby prowadzącej (osób prowadzących)			
dr Karolina Jagiełło; prof. UG, dr hab. Tomasz Puzyn; dr Agnieszka Gajewicz			
Formy zajęć, sposób ich realizacji i przypisana im liczba godzin			Liczba punktów ECTS
Formy zajęć			2
Wykład, Ćw. laboratoryjne			zajęcia - 30 godz.
Sposób realizacji zajęć			konsultacje - 5 godz.
zajęcia w sali dydaktycznej			praca własna studenta - 15 godz.
Liczba godzin			RAZEM: 50 godz. - 2 ECTS
Wykład: 15 godz., Ćw. laboratoryjne: 15 godz.			
Cykl dydaktyczny			
2016/2017 letni			
Status przedmiotu		Język wykładowy	
fakultatywny (do wyboru)		polski	
Metody dydaktyczne		Forma i sposób zaliczenia oraz podstawowe kryteria oceny lub wymagania egzaminacyjne	
- wykonywanie zestawu ćwiczeń w pracowni komputerowej na podstawie instrukcji otrzymanej od prowadzącego, połączone z analizą i dyskusją uzyskanych wyników w formie pisemnego sprawozdania. - •wykład z prezentacją multimedialną,		Sposób zaliczenia	
		Zaliczenie na ocenę	
		Formy zaliczenia	
		Wykład: •zaliczenie pisemne z pytaniami testowymi oraz zaliczenie ustne (uzupełnienie egzaminu pisemnego). Ćwiczenia laboratoryjne: •wykonywanie zestawu ćwiczeń w laboratorium komputerowym oraz pisemna prezentacja uzyskanych wyników po każdym ćwiczeniu (sprawozdania), •kolokwium wejściowe przed każdym ćwiczeniem, •ustalenie oceny zaliczeniowej na podstawie ocen cząstkowych.	
		Podstawowe kryteria oceny	

Wykład:
Zaliczenie pisemne składające się z kilkunastu pytań testowych obejmujących zagadnienia wymienione w treściach programowych wykładu i ćwiczeń laboratoryjnych. Warunkiem uzyskania pozytywnej oceny z zaliczenia pisemnego jest zdobycie minimum 51% punktów możliwych do uzyskania. Skala ocen jest zgodna z obowiązującym na Uniwersytecie Gdańskim regulaminem studiów.

Zaliczenie ustne jest obowiązkowe dla studentów, którzy uzyskali z egzaminu pisemnego wynik pomiędzy 41% a 50%. W tym przypadku na student otrzymuje szansę uzupełnienia punktów brakujących do uzyskania oceny dostatecznej (omawia sposób poprawnego rozwiązania zadań z zaliczenia pisemnego).

Negatywna ocena z zaliczenia (pisemnego i ustnego) musi być poprawiona podczas zaliczenia poprawkowego odbywającego się w oparciu o te same zasady co zaliczenie w pierwszym terminie.

Ćwiczenia laboratoryjne:
Samodzielne wykonanie wszystkich zadanych ćwiczeń w pracowni komputerowej. Nieobecność można odrobić podczas zajęć z inną grupą ćwiczeniową lub w trakcie konsultacji u prowadzącego.

Potwierdzenie umiejętności prezentacji uzyskanych wyników oraz ich naukowej dyskusji poprzez uzyskanie pozytywnej oceny ze sprawozdań obejmujących wykonane ćwiczenia.

Zaliczenie wszystkich kolokwium wejściowych obejmujących podstawowe zagadnienia teoretyczne niezbędne do poprawnego wykonania ćwiczenia. Niezaliczone kolokwia należy poprawić w dodatkowym terminie wyznaczonym przez prowadzącego na zakończenie semestru (poza zajęciami).

Ocena końcowa z ćwiczeń jest średnią ważoną ze średnich arytmetycznych ocen otrzymanych z (i) kolokwium (waga 40%), oraz (ii) sprawozdań obejmujących wykonane ćwiczenia (waga 60%). Ocena może być podwyższona o połowę studentom szczególnie aktywnie uczestniczącym w dyskusji naukowej podczas zajęć.

Niezaliczenie ćwiczeń laboratoryjnych skutkuje niedopuszczeniem do zaliczenia wykładu do chwili uzyskania zaliczenia.

Sposób weryfikacji założonych efektów kształcenia

Sposób weryfikacji przyswojenia wiedzy:

Student wie jak prawidłowo odpowiedzieć na pytanie zakresu podstaw teoretycznych wybranych metod chemometrycznych (K_W08, K_W07); prawidłowo wskaże zastosowania metod chemometrycznych w analizie widm spektralnych (K_W06)

Sposób weryfikacji nabycia umiejętności:

Po ukończeniu kursu każdy student potrafi samodzielnie zastosować metody chemometryczne do analizy widm spektralnych (K_U05, K_U06), prawidłowo prowadzi dyskusję uzyskanych wyników odnosząc się do wcześniej zdobytej wiedzy z zakresu nauk chemicznych oraz pokrewnych dyscyplin naukowych (K_U01).

Sposób weryfikacji nabrania kompetencji społecznych:

Student dostrzega korzyści z wykorzystania metod chemometrycznych do swojej codziennej praktyki badawczej (K_K06); rozumie potrzebę dalszego kształcenia się (K_K01); wykazuje kreatywność w pracy w grupie (K_K02).

Określenie przedmiotów wprowadzających wraz z wymogami wstępnymi

A. Wymagania formalne

Spektroskopia chemiczna

B. Wymagania wstępne

posiadanie wiedzy podstawowej z zakresu chemii ogólnej oraz instrumentalnej

Cele kształcenia

Zaprezentowanie studentom algorytmu działania wybranych metod chemometrycznych.

Zdobycie przez studentów umiejętności posługiwania się najważniejszymi metodami chemometrycznymi i sposobem ich zastosowania w analizie widm spektralnych.

Treści programowe

A. Problematyka wykładu:

Podstawy teoretyczne wybranych technik chemometrycznych;

Widmo absorpcyjne jako wektor w wielowymiarowej przestrzeni; sposoby traktowanie widm: ujęcie klasyczne vs. ujęcie geometryczne;

Metody skalowania widm: centrowanie kolumnowe, centrowanie wierszowe, standaryzacja;

Metody chemometryczne stosowane w analizie widm spektralnych: hierarchiczna analiza skupień (HCA) do analizy relacji między widmami; analiza głównych składowych (PCA) do określania liczby form spektralnych obecnych w roztworze (skład próbek), metoda samouzgadniania widm (NSD)

jako metoda uzyskiwani widm form spektralnych obecnych w roztworze.

B. Problematyka ćwiczeń laboratoryjnych:

Zastosowanie metod chemometrycznych przedstawionych na wykładzie w analizie widm spektralnych

Wykaz literatury

A.1. wykorzystywana podczas zajęć

Instrukcje do ćwiczeń przygotowywane przez prowadzących zajęcia.

A.2. studiowana samodzielnie przez studenta

J. Mazerski: Podstawy chemometrii. Gdańsk, Wydawnictwo Politechniki Gdańskiej, 2000

B. Literatura uzupełniająca:

S. D. Brown, R. Tauler, B. Walczak (red.): Comprehensive chemometrics: Chemical and biochemical data analysis. Amsterdam: Elsevier, 2009

R. Kramer: Chemometric techniques for quantitative analysis. New York: Marcel Dekker, Inc, 2005

D. Zuba, A. Parczewski (red.): Chemometria w analityce: wybrane zagadnienia. Kraków: Wydawnictwo Instytutu Ekspertyz Sądowych, 2003

Efekty kształcenia (obszarowe i kierunkowe)

K_W06 – wybiera techniki matematyki wyższej w zakresie niezbędnym dla zrozumienia i opisu procesów chemicznych oraz procesów fizycznych ważnych dla zrozumienia chemii

K_W07 – rozumie oraz opisuje prawidłowości, zjawiska i procesy fizykochemiczne wykorzystując język matematyki

K_W08 – wykazuje się znajomością podstawowych metod obliczeniowych do rozwiązywania problemów z zakresu chemii, fizyki i matematyki

K_U01 – identyfikuje, analizuje i rozwiązuje problemy z zakresu szeroko pojętej chemii w oparciu o zdobytą wiedzę

K_U05 – stosuje podstawowe metody statystyczne i techniki informatyczne do opisu procesów chemicznych i analizy danych eksperymentalnych

K_U06 - wykorzystuje podstawowe pakiety oprogramowania użytkowego do rozwiązywania problemów z zakresu nauk ścisłych

K_K06 – podnosi swoje kompetencje zawodowe i osobiste poprzez korzystanie z informacji podawanych w różnych źródłach

K_K01 – identyfikuje poziom swojej wiedzy i umiejętności, potrzebę ciągłego doskonalenia się oraz rozwoju osobistego

K_K02 – pracuje indywidualnie wykazując inicjatywę i samodzielność działania oraz współdziała w zespole przyjmując w nim różne funkcje

Wiedza

Po ukończeniu kursu każdy student:

Zna podstawowy podział metod chemometrycznych;

Wymieni zastosowanie poszczególnych grup metod chemometrycznych do analizy widm spektralnych;

Zna podstawy teoretyczne (algorytmy działania) najważniejszych metod chemometrycznych mających zastosowanie w analizie widm spektralnych.

Umiejętności

Po ukończeniu kursu każdy student:

potrafi samodzielnie zaproponować i zastosować wybrane techniki chemometryczne do analizy widm spektralnych;

krytycznie weryfikuje uzyskane rezultaty.

Kompetencje społeczne (postawy)

Po ukończeniu kursu każdy student:

dostrzega korzyści z wykorzystania metod chemometrycznych do swojej codziennej praktyki badawczej;

rozumie potrzebę dalszego kształcenia się;

wykazuje kreatywność w pracy grupie;

wykazuje odpowiedzialność za wykonywaną pracę.

Kontakt

karolina.jagiello@ug.edu.pl