

# КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА

хімічний факультет

Кафедра аналітичної хімії



«ЗАТВЕРДЖУЮ»

Заступник декана  
з навчальної роботи  
В.О. Павленко

« 27 » квітня 20 18 року

## РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

### ІННОВАЦІЙНІ ТЕХНОЛОГІЇ В АНАЛІТИЧНІЙ ХІМІЇ

для аспірантів

галузі знань 10 Природничі науки  
спеціальність 102 Хімія  
спеціалізація „Аналітична хімія”  
освітній рівень третій “освітньо-науковий”  
освітньо-наукова програма Хімія  
вид дисципліни вибіркова

Форма навчання денна  
Навчальний рік 2017/2018  
Період навчання 2 рік  
Кількість кредитів ECTS 4  
Мова викладання, навчання та оцінювання українська  
Форма заключного контролю іспит

Викладач (лектор): Запорожець Ольга Антонівна

Пролонговано: на 2018/2019 н.р. *В.О. Павленко* « 27 » 04 2018 р.

на 2019/2020 н.р. *В.О. Павленко* « 05 » 04 2019 р.

КИЇВ – 2017

Розробники: **Запорожець Ольга Антонівна**, д.х.н., проф., професор кафедри аналітичної хімії;  
**Іценко Микола Володимирович**, к.х.н., доц., доцент кафедри аналітичної хімії

Робоча програма дисципліни «Інноваційні технології в аналітичній хімії» затверджена на засіданні кафедри аналітичної хімії

Протокол № “ 7 ” від 20 квітня 2017 року

Зав. кафедри аналітичної хімії

—  —

(О.А. Запорожець)  
(прізвище та ініціали)

«20 » квітня 2017 року

Схвалено науково - методичною комісією хімічного факультету

Протокол № 4 від “ 25 ” квітня 2017 року

Голова науково-методичної комісії \_\_\_\_\_  \_\_\_\_\_ (Амірханов В.М.)

«\_27\_» \_квітня 2017 року

Протокол № 4 від “ 25 ” квітня 2018 року

Голова науково-методичної комісії \_\_\_\_\_  \_\_\_\_\_ ( Роїк О.С. )

«\_25\_» \_квітня 2018 року

Протокол № 3 від “03” квітня 2019 року

Голова науково-методичної комісії \_\_\_\_\_  \_\_\_\_\_ ( Роїк О.С. )

“ 03” квітня 2019 року

**1. Мета дисципліни** – Формування у аспіранта системи знань та вмінь щодо планування ефективних експериментів з розробки та валідації методик визначення елементів та речовин різної природи, прийомів оптимізації наукових експериментів та технологічних процесів, а також математичної обробки результатів експериментів у галузі хімії.

**2. Попередні вимоги до опанування навчальної дисципліни:**

*Аспірант повинен знати:* вищу математику (матрична алгебра), неорганічну хімію, аналітичну хімію, органічну та фізичну хімію, статистичні методи в хімії на рівні випускника магістратури Київського національного університету імені Тараса Шевченка.

*Аспірант повинен вміти:* використовувати на практиці методи математичної статистики, загальні теоретичні положення спектральних методів досліджень, хроматографії та біоаналітичної хімії на рівні випускника магістратури Київського національного університету імені Тараса Шевченка.

*Аспірант повинен володіти навичками* пошуку інформації, її критичної обробки та представлення, застосовувати отримані знання для вирішення прикладних та теоретичних задач у галузі хімії.

**3. Анотація навчальної дисципліни.** Дисципліна «Інноваційні технології в аналітичній хімії» належить до переліку дисциплін вільного вибору аспіранта. В рамках курсу планується поглибити системні знання аспірантів в галузі математичної статистики, хемометрики та математичної обробки експериментальних даних. Значну увагу при читанні курсу планується приділити методам математичної обробки спектральних та хроматографічних даних, а також візуалізації результатів експериментів. В курсі будуть розглянуті методи хемометричної класифікації, багатовимірної регресії та задачі оптимізації з побудовою поверхонь відгуку.

**4. Завдання:** забезпечити підготовку аспірантів до дослідницької роботи в сучасних аналітичних та дослідницьких хімічних лабораторіях; розвинути навички планування та інтерпретації складних багатовимірних експериментів.

**5. Результати навчання за дисципліною:**

Код	Результат навчання	Форми викладання і навчання	Методи оцінювання	Відсоток у підсумковій оцінці з дисципліни
<b>1. Знання</b>				
1.1	Знання математичних і статистичних методів обробки спектральних і хроматографічних даних	лекції, самостійні	ПтК-1, ПтК-3, ПсК	10
1.2	Знання основ хемометричних методів класифікації та багатовимірної регресії	лекції, семінарські, самостійні	ПтК-1, ПтК-3, ПсК	15
1.3	Знання способів планування, дизайну, та оптимізації наукових експериментів	лекції, семінарські, самостійні	ПтК-1, ПтК-3, ПсК	15
<b>2. Вміння</b>				
2.1	Вміння застосовувати методи дисперсійного аналізу та хемометричної обробки даних для оптимізації і обробки результатів досліджень	практичні, самостійні	ПтК-1, ПтК-3, ПсК	15

<b>2.2</b>	Розв'язання комплексних проблем оптимізації і планування експериментів у хімії	лекції самостійні	ПтК-3, ПсК	10
<b>2.3</b>	Набуття універсальних навичок усної і письмової презентації результатів власного наукового дослідження; збір і критичний аналіз наукової літератури, у тому числі іноземної, за заданою темою	практичні, , самостійні	ПтК-1, ПтК-3, ПсК	15
<b>3. Комунікація</b>				
<b>3.1</b>	Застосування сучасних інформаційно-комунікаційні технології для збору, аналізу, обробки та інтерпретації інформації у галузі хімії	лекції, практичні, самостійні	ПтК-1, ПтК-3, ПсК	5
<b>3.2</b>	Вільне спілкування з питань, що стосуються сфери наукових та експертних знань, з колегами	практичні, , самостійні	ПтК-1, ПтК-3, ПсК	5
<b>4. Автономність та відповідальність</b>				
<b>4.1</b>	Аналіз проблеми, самостійне планування та інтерпретування результатів експерименту	практичні, самостійні	ПтК-1, ПтК-2, ПтК-3, ПсК	5
<b>4.2</b>	Дотримуватися правил наукової етики та доброчесності в процесі критичної обробки наявної та створенні нової інформації у галузі аналітичної хімії	Практичні, самостійні	ПтК-2, ПтК-3, ПсК	5

\* поточний контроль, активність під час лекційних – ПтК-1, лабораторних ПтК-2 і контроль самостійної роботи ПтК-3, підсумковий контроль ПсК

**6. Співвідношення результатів навчання дисципліни (РНД) із програмними результатами навчання (ПРН):**

ПРН \ РНД (код)	1.1	1.2	1.3	2.1	2.2	2.3	3.1	3.2	4.1	4.2
<b>Знання</b>										
Концептуальні наукові та практичні знання	+	+	+	+						
Критичне осмислення теорій, принципів, методів і понять у сфері професійної діяльності та/або навчання		+	+	+	+		+			+
<b>Уміння</b>										
Спеціалізовані уміння/навички і методи, необхідні для розв'язання значущих проблем у сфері професійної діяльності, науки та/або інновацій, розширення та переоцінки вже існуючих знань і професійної практики				+	+	+		+	+	
Започаткування, планування, реалізація та коригування послідовного процесу ґрунтовного наукового дослідження з дотриманням належної академічної доброчесності					+	+	+		+	+
Критичний аналіз, оцінка і синтез нових та комплексних ідей				+	+		+	+	+	
<b>Комунікація</b>										
Вільне спілкування з питань, що стосуються сфери наукових та експертних знань, з колегами, широкою науковою спільнотою, суспільством в цілому					+	+	+		+	
Вільне спілкування з питань, що стосуються сфери наукових та експертних знань, з колегами, широкою науковою спільнотою, суспільством в цілому			+		+		+	+		
<b>Автономія та відповідальність</b>										
Демонстрація значної авторитетності, інноваційності, високий ступінь самостійності, академічна та професійна доброчесність, послідовна відданість розвитку нових ідей або процесів у передових контекстах професійної та наукової діяльності						+		+	+	+
Здатність до безперервного саморозвитку та самовдосконалення	+	+	+	+	+	+	+		+	+

**7. Схема формування оцінки**

Результати навчальної діяльності аспірантів оцінюються за 100 - бальною шкалою . Модульний контроль включає 1 змістовний модуль і комплексний підсумковий модуль (іспит).

Загалом за семестр: 1 модульна контрольна робота; 2 семінарські заняття.

**- семестрове оцінювання**

1.1. презентація рефератів

- 1.2. виконання домашньої самостійної роботи;  
 1.3. написання модульної контрольної роботи.  
 - підсумкове оцінювання іспит.

Максимальна оцінка за семестр: **60 балів.**

Максимальна оцінка на іспиті: **40 балів.**

Максимальна загальна оцінка за курс: **100 балів.**

**Організація оцінювання** (за формами контролю згідно з графіком навчального процесу):

*Оцінювання за формами контролю:*

	Змістовий модуль1 (ЗМ1)	
	Min. – балів	Max. – бали
Презентація реферату	12	20
Самостійна робота	12	20
Модульна контрольна робота	12	20
Загальна сума	36	60

*При простому розрахунку ПО= ЗМ1 + КІМ отримуємо:*

	ЗМ1	Комплексний підсумковий модуль (КІМ) - іспит	Підсумкова оцінка (ПО)
Максимум	60	40	100
Мінімум	36	24	60
Критичний мінімум	20	40	60

Для здобувачів, які набрали сумарно меншу кількість балів ніж *критично-розрахунковий мінімум – 20 балів* для одержання заліку обов'язково слід відпрацювати всі заборгованості та написати модульні контрольні роботи мінімум на 15 балів із 20.

У випадку відсутності здобувача з поважних причин відпрацювання та перездачі МКР здійснюються у відповідності до «Положення про організацію освітнього процесу у Київському національному університеті імені Тараса Шевченка» від 31 серпня 2018 року

### Шкала відповідності оцінок

<b>Відмінно</b> / Excellent	90-100
<b>Добре</b> / Good	75-89
<b>Задовільно</b> / Satisfactory	60-74
<b>Незадовільно</b> з можливістю повторного складання / Fail	35-59
<b>Незадовільно</b> з обов'язковим повторним вивченням дисципліни / Fail	0-34

**8. СТРУКТУРА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ**  
**НАВЧАЛЬНО-ТЕМАТИЧНИЙ ПЛАН ЛЕКЦІЙ ТА ПРАКТИЧНИХ ЗАНЯТЬ**

№ Теми	Назва Теми	Кількість годин		
		Лекції	Практ. Заняття	Самост. робота
1	Вступ. Статистичні перевірки гіпотез, одно- та багатофакторний дисперсійний аналіз. Регресійний аналіз, множинна регресія.	2		6
2	Візуалізація експериментальних даних. Методи обробки та попередньої підготовки спектральних даних. Основи матричної алгебри.	2		20
3	Методи хемометричної класифікації та регресії. Метод головних компонент та часткових найменших квадратів. Кластерний аналіз.	4	2	20
4	Методи планування експериментів. Факторний дизайн експериментів. Частковий та повний дизайн.	4	2	20
5	Дробні факторні плани. Факторний план Плакета-Бермана	4	2	20
6	Задачі оптимізації. Побудова поверхонь відгуку.	2	2	10
Модульна контрольна робота		2		
<b>ВСЬОГО</b>		<b>18</b>	<b>8</b>	<b>96</b>

Загальний обсяг **124 год.**, в тому числі:

Лекції – **18 год.**

Практичні заняття – **8 год**

Самостійна робота – **96 год.**

Консультації - **2 год**

## 9. Рекомендована література:

### Основна

1. Хемометрика в аналитической химии / О. Е. Родионова, А. Л. Померанцев // Институт химической физики им. Н.Н. Семенова РАН, - 1999г - стр. 5, 9-10
2. Эсбенсен К. Анализ многомерных данных. Избранные главы / Пер. с англ. С.В. Кучерявского; Под ред. О.Е. Родионовой. – Черногоровка: Изд-во ИПХФ РАН. – 2005. – 160 с.
3. Хемометрика в Excel: учебное пособие / Алексей Померанцев при участии О. Е. Родионовой ; М-во образования и науки Российской Федерации, Федеральное гос. бюджетное образовательное учреждение высш. проф. образования "Нац. исследовательский Томский политехнический ун-т". - Томск : Изд-во Томского политехнического ун-та, 2014. - 434 с. : ил., табл.; 21 см.; ISBN 978-5-4387-0374-7
4. М. Отто, Современные методы аналитической химии, М. Техносфера, 2006.
5. Дёрффель К. Статистика в аналитической химии. М. Мир, 1994, 1994, 350 с.

### Додаткова:

1. Chemometrics in chromatography / editors, Lukasz Komsta, Yvan Vander Heyden, Joseph Sherma. RC Press, 2018. Series: Chromatographic science. ISBN 9781498772532
2. Burgard, David R. Chemometrics : chemical and sensory data / David R. Burgard, James T. Kuznicki © 1990 by CRC Press, Inc, ISBN 13: 978-1-315-89150-7
3. Chemometrics in Analytical Spectroscopy, 2nd ed By Mike J. Adams (RMIT University, Melbourne, Australia). Royal Society of Chemistry: Cambridge. 2004. xi + 224 pp. ISBN 0-85404-595-3.
4. Chemometrics : data driven extraction for science / Richard G.Brereton, Second edition. | Hoboken, NJ : JohnWiley & Sons, 2018, ISBN 9781118904664.