**Zapewnienie i kontrola jakości w laboratorium analitycznym**

1. Podstawowe pojęcia i zasady metrologii chemicznej
2. Krótka historia pomiarów w ogóle i w analityce chemicznej w szczególności
3. Znaczenie jakości pomiarów chemicznych. Definicja metrologii chemicznej.
4. Trzy filary metrologii chemicznej

* spójność pomiarowa
* walidacja procedur analitycznych
* niepewność pomiarowa, wymagania związane z niepewnością, źródła i wyznaczanie/obliczanie niepewności

1. Sterowanie jakością badań

* System zarządzania jakością
* Zapewnienie i kontrola jakości QA/QC
* Nadzór nad jakością

1. Próbka w laboratorium analitycznym
   1. Znaczenie prawidłowego pobierania próbek
   2. Typy próbek – od próbki pierwotnej do analitycznej
   3. Planowanie poboru próbek, aspekty prawne
   4. Techniki poboru próbek w zależności od właściwości fizykochemicznych badanego materiału
   5. Przechowywanie próbek (warunki, opakowania, oznaczenia, czas)
   6. Operacje wstępne na próbkach (derywatyzacja, metody oczyszczania i zatężania)
   7. Pobór próbek źródłem niepewności pomiarowej
   8. Obliczanie pożądanej liczebności i wielkości próbek
   9. Zagadnienia, związane z poborem próbek specyficzne dla przemysłu farmaceutycznego
2. Przygotowanie doświadczenia analitycznego
3. Dobór metody analitycznej - kryteria techniczne i ekonomiczne
4. Sposób prowadzenia pomiarów (krzywa kalibracyjna, dodatek wzorca etc.) dla różnych rodzajów analitów/matryc/metod analitycznych.
5. Przygotowanie próbek kalibracyjnych i walidacyjnych
6. Chemiczne materiały odniesienia
7. Metoda odniesienia. Porównanie dwóch metod analitycznych przy pomocy narzędzi statystycznych.
8. Błędy w analizie chemicznej
   1. Reguły zaokrąglania cyfr (cyfry znaczące).
   2. Rodzaje i źródła błędów w analizie.
   3. Przyczyny występowania błędów. Rodzaje i charakterystyka błędów występujących w analizie, ich wpływ na wynik analizy i interpretację wyników.
   4. Możliwości uniknięcia błędów, ich usunięcia, wprowadzenia poprawki lub standaryzacji.
   5. Sposoby odrzucania wyników obarczonych błędami grubymi.
   6. Wyznaczanie wartości błędu stałego, zmiennego oraz mieszanego (stały i zmienny).
9. Parametry charakteryzujące metodę analityczną.
   1. Definicje i opis podstawowych parametrów charakteryzujących metodę analityczną takich, jak: dokładność, poprawność, precyzja, powtarzalność, odtwarzalność, precyzja pośrednia, liniowość, zakres roboczy, stabilność, wzajemne zależności poparte przykładami.
   2. Omówienie wszystkich etapów analizy zapewniających prawidłowość walidacji w tym parametrów wpływających na niepewność jak np. odzysk, odporność, selektywność, specyficzność, ich wzajemne zależności.
10. Statystyczne kryteria oceny wyników.
    1. Definicja statystyki, zalety i niebezpieczeństwa jej stosowania.
    2. Rozkłady zmiennych losowych, miary położenia, miary rozproszenia i skupienia. Ocena rzetelności, dokładności i powtarzalności na przykładach.
    3. Współzależność zmiennych: współczynnik korelacji i determinacji, równanie linii regresji z przykładami.
    4. Ocena statystyczna wyników analizy na przykładach.
11. Metodologia chemometrii
    1. Wprowadzenie, założenia metod chemometrycznych, metodologia analiz, zadania chemometryczne
    2. Staranne planowanie aspektu uzyskiwania danych (aspekty planowania doświadczeń)
    3. Archiwizacja i kontrola danych (gromadzenie i kontrola wyników)
    4. Dokumentacja danych i wyników (nazwy zmiennych, arkusze kalkulacyjne, brakujące dane, rozkłady zmiennych, punkty odbiegające. Wizualizacja danych
    5. Modelowanie zależności (modele numeryczne i empiryczne) (istotność modelu i zdolność prognostyczna modelu – metoda odrzucania i dołączania)
    6. Optymalizacja doświadczalna (dobór metody optymalizacji)
    7. Analiza skupień, analiza głównych składowych
    8. Zastosowania chemometrii w laboratorium analitycznym – krzywe kalibracyjne, kalibracja jedno i wielowymiarowa
    9. Przykłady zastosowania chemometrii w badaniu żywności, ochronie środowiska i naukach sądowy

Sposób zaliczenia przedmiotu – na podstawie obecności i sprawdzianów pisemnych po każdych zajęciach z omówionych treści teoretycznych oraz problemów obliczeniowych (możliwość korzystania z własnych notatek z zajęć).