

ДЕРЖАВНИЙ ВИЩИЙ НАВЧАЛЬНИЙ ЗАКЛАД
«УЖГОРОДСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ»
НАВЧАЛЬНО-НАУКОВИЙ ІНСТИТУТ ХІМІЇ ТА ЕКОЛОГІЇ

Кафедра аналітичної хімії



“ЗАТВЕРДЖУЮ”

Директор ІНХЕ ДВНЗ «УЖНУ»

Василь ЛЕНДЄЛ

28 червня 2024 року

РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ
НАУКОВІ ОСНОВИ ХЕМОМЕТРІЇ

Рівень вищої освіти	другий (магістерський) рівень
Галузь знань	01 Освіта/Педагогіка
Спеціальність	014 Середня освіта
Предметна спеціальність	014.06 Середня освіта (Хімія)
Освітньо-наукова програма	Хімія
Статус дисципліни	обов'язкова
Мова навчання	Українська

Робоча програма навчальної дисципліни «**Наукові основи хемометрії**» для здобувачів вищої освіти галузі знань **01 Освіта/Педагогіка** спеціальності **014 Середня освіта**, предметної спеціальності **014.06 Середня освіта (Хімія)** освітньо-наукової програми **Хімія**.

Розробник: Базель Я.Р., професор, доктор хімічних наук.

Робочу програму розглянуто та затверджено на засіданні кафедри *аналітичної хімії* протокол № 9 від «8» квітня 2024 р.

Завідувач кафедри  Ярослав СТУДЕНЯК

Схвалено науково-методичною комісією навчально-наукового інституту хімії та екології протокол № 11 від 28 червня 2024 р.

Голова науково-методичної комісії  Михайло СЛИВКА

© Ярослав Базель, 2024 р.

© ДВНЗ «Ужгородський національний університет», 2024 р.

1. ОПИС НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

Найменування Показників	Розподіл годин за навчальним планом
	Денна форма навчання
Кількість кредитів ЄКТС – 4	Рік підготовки: 2
Загальна кількість годин – 120	
Кількість модулів – 2	Семестр: 3
Тижневих годин: 2 аудиторних – 42 самостійної роботи студента – 78	Лекції:
	16
	Практичні (семінарські):
	0
Вид підсумкового контролю: іспит	Лабораторні:
	26
Форма підсумкового контролю: усний	Самостійна робота:
	78

2. МЕТА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

Хемоμετрія є фундаментальною дисципліною, яка виникла на стику хімії та математики. Метою вивчення навчальної дисципліни «**Наукові основи хемоμετрії**» є розгляд наукових основ важливіших хемоμετричних методів та підходів. В останні роки такий підхід є все більш важливим і широко використовуються при наукових дослідженнях практично в усіх галузях хімії, однак найбільш важливим він є для аналітичної хімії. Вивчення даного курсу студентами буде важливим для формування в них цілісного хімічного світогляду та системного погляду на суть важливіших хімічних процесів і явищ. Особливе місце в курсі займають підходи статистики для обробки результатів вимірювань, що є базою для оцінки та інтерпретації експерименту у бідь-якій галузі хімічної науки. Студентам пропонується доволі широкий перелік розрахункових завдань, що стосуються хемоμετричної та статистичної обробки результатів хімічних вимірювань. Зазвичай ці завдання пов'язані з прикладами з практики вимірювання.

Доступність комп'ютерної техніки дозволяє суттєво елімінувати час на рутинні розрахункові операції і зосередити більше уваги на розумінні теоретичних підходів і умов виконання тих чи інших експериментів чи методів розрахунків. Власне, практично всі розрахунки можуть бути виконані за допомогою комп'ютерних підходів на основі відомих і поширених операційних систем. Вся необхідна література, а також презентації лекцій, практичні та лабораторні завдання, завдання для самостійної роботи студентів, а також табличні і довідкові матеріали є доступними в мережі електронного навчання Moodle.

Відповідно до освітньо-наукової програми «Хімія» за спеціальності 014 Середня освіта, предметної спеціальності 014.06 Середня освіта (Хімія), вивчення дисципліни «**Наукові основи хемометрії**» сприяє формуванню у здобувачів вищої освіти таких компетентностей:

Компетентність	Спеціальність 014 Середня освіта, предметна спеціальність 014.06 Середня освіта (Хімія)
ІК1	Здатність розв'язувати прикладні задачі та практичні проблеми дослідницького та/або інноваційного характеру під час професійної діяльності у галузі освіти, що передбачає застосування теорій та методів хімії.
ЗК7	Здатність здійснювати науково-педагогічні дослідження, прогнозувати та презентувати їх результати.
ЗК8	Здатність застосовувати принципи і методи наукового пізнання у науково-педагогічній діяльності.
ФК1	Здатність розуміти предметну область і специфіку професійної діяльності.
ФК 9	Здатність до організації та здійснення наукових досліджень в галузі теорії та методики навчання хімії, узагальненні одержаних результатів, а також впровадженні їх в освітній процес.
ФК12	Здатність обирати оптимальні методи та методики наукового дослідження; уміння працювати з хімічними реактивами і матеріалами.

3. ПЕРЕДУМОВИ ДЛЯ ВИВЧЕННЯ НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

Передумови вивчення навчальної дисципліни «**Наукові основи хемометрії**» є опанування таких навчальних дисциплін (НД) відповідних освітніх програм (ОП):

Освітньо-наукова програма «Хімія» за спеціальності 014 Середня освіта, предметної спеціальності 014.06 Середня освіта (Хімія)	
OK1	Іноземна мова за професійним спрямуванням
OK5	Охорона праці в галузі
OK6	Вибрані розділи органічної хімії
OK8	Аналітичні сенсорні системи
OK11	Вибрані розділи неорганічної хімії

4. ОЧІКУВАНІ РЕЗУЛЬТАТИ НАВЧАННЯ

Відповідно до освітньо-наукової програм «Хімія» за спеціальністю 014 Середня освіта, предметною спеціальністю 014.06 Середня освіта (Хімія), вивчення навчальної дисципліни «**Наукові основи хемометрії**» повинно забезпечити досягнення здобувачами вищої освіти таких програмних результатів навчання (ПРН):

Програмні результати навчання	Шифр ПРН
Демонструє вміння застосовувати знання з психології, педагогіки, хімії у практичних ситуаціях здійснення освітньої діяльності, поглиблює знання з предметної області.	1
Визначає і характеризує основні принципи, закони та методики науково-педагогічних досліджень; описує апарат науково-педагогічного дослідження, демонструє навички презентації результатів науково-педагогічного дослідження	5
Застосовує принципи і методи наукового пізнання до визначення проблем у сфері науково-педагогічної діяльності, пропонує шляхи їх вирішення; демонструє дотримання прав інтелектуальної власності на результати дослідницької/інноваційної діяльності.	13
Вміє організовувати та проводити наукові дослідження в галузі теорії та методики навчання хімії, узагальнення одержаних результатів, а також впроваджувати їх в освітній процес.	16
Вміє організовувати та володіє методологією наукового дослідження.	19

Очікувані результати навчання, які повинні бути досягнуті здобувачами освіти після опанування навчальної дисципліни «**Наукові основи хемометрії**»:

Очікувані результати навчання з дисципліни	Шифр ПРН
Здобувач буде вміти застосовувати набуті знання з хімії та хемометрії у різних практичних аспектах та ситуаціях майбутньої діяльності.	1
Здобувач буде вміти характеризувати основні принципи, закони та методики наукових та науково-педагогічних досліджень, готувати презентації та презентувати результати досліджень.	5
Здобувач буде мати сформований світогляд та системний погляд на суть важливіших хімічних процесів і явищ, вмітиме вибирати оптимальний шлях вирішення проблем у сфері науково-дослідницької, освітньої та методичної діяльності з дотриманням прав інтелектуальної власності.	13
Здобувач буде вміти проводити наукові та педагогічні дослідження, обробляти, узагальнювати та інтерпретувати результати хімічних експериментів.	16
Здобувач володітиме методологією наукового дослідження, науковими основами важливіших хемометричних методів та статистичних підходів.	19

5. ЗАСОБИ ДІАГНОСТИКИ ТА КРИТЕРІЇ ОЦІНЮВАННЯ РЕЗУЛЬТАТІВ НАВЧАННЯ

Засоби оцінювання та методи демонстрування результатів навчання

Засобами оцінювання та методами демонстрування результатів навчання з навчальної дисципліни є якість виконання та оформлення лабораторних робіт з курсу та написання модульних контрольних робіт, іспит.

Форми контролю та критерії оцінювання результатів навчання

Форми поточного контролю: лабораторні роботи (якість виконання, відповіді на контрольні питання, підготовка презентацій).

Форма модульного контролю: модульні контрольні роботи №1 та №2 у тестовій формі системи Moodle.

Форма підсумкового семестрового контролю: іспит

Розподіл балів, які отримують здобувачі вищої освіти за змістовий модуль 1

Поточне оцінювання та самостійна робота			Модульна контрольна робота	Сума
T1	T2	T3	50	100
10	20	20		

Розподіл балів, які отримують здобувачі вищої освіти за змістовий модуль 2

Поточне оцінювання та самостійна робота			Модульна контрольна робота	Сума
T4	T5	T6	50	100
10	20	20		

Оцінювання окремих видів навчальної роботи з дисципліни

Вид діяльності здобувача вищої освіти	Змістовий модуль 1		Змістовий модуль 2	
	Кількість	Максимальна кількість балів (сумарна)	Кількість	Максимальна кількість балів (сумарна)
Лабораторні заняття (допуск, виконання та захист)	2	20	4	40
Комп'ютерне тестування при тематичному оцінюванні	2	10	1	10
Підготовка презентацій	4	20	0	0
Модульна контрольна робота	1	50	1	50
Разом	9	100	6	100

Критерії оцінювання підсумкового семестрового контролю

Завданням підсумкового контролю є перевірка розуміння здобувачем освіти програмового матеріалу в цілому, логіки та взаємозв'язків між окремими розділами, здатності творчого використання накопичених знань, уміння сформулювати своє ставлення до певної проблеми навчальної дисципліни.

Кількість балів, яку набрав студент з курсу «**Наукові основи хемометрії**», визначається сумою балів з відповідних модулів дисципліни. Загальна кількість балів складає 100%. Переведення кількості набраних балів в оцінку здійснюється згідно схеми:

Відсоток від загальної суми балів	Диференційована шкала	Шкала ECTS
90-100	відмінно	A
82-89	добре	B
74-81		C
64-73	задовільно	D

60-63		E
35-59	незадовільно	F _x
0-34		F

Іспит виставляється автоматично, якщо здобувачем освіти за результатами підсумкового балу було набрано мінімум 60 % від можливих балів і здобувач освіти погоджується із оцінкою. Відповідно, ті здобувачі, хто не набрав 60% балів, але отримав більше 34 % зобов'язані здавати іспит. Студенти які не виконали навчальну програму та отримали 34 % і менше – до іспиту не допускаються. Студенти, які не здали і не відпрацювали заняття експериментального циклу (лабораторні роботи), до іспиту не допускаються, не залежно від кількості набраних балів за теоретичний цикл (колоквіуми, комп'ютерне тестування, презентації, модульні контрольні роботи). Результати навчання, отримані студентами в результаті неформального навчання (сертифікатні програми, тренінги (стажування), короткотермінові курси, літні школи під керівництвом тренерів, репетиторів та інших фахівців тощо) та інформального навчання (самоорганізоване здобуття певних компетентностей, зокрема під час повсякденної діяльності, пов'язаної з професійною (самостійне опрацювання тематичних наукових праць), громадською або іншою діяльністю), можуть бути зараховані рейтинговими балами як окремий зріз знань (тема).

Критерії оцінки поточної навчальної діяльності:

- повна і правильна відповідь на теоретичні запитання та виконані або не повністю виконані практичні завдання (при наявності) - оцінка 90-100 балів;
- достатня відповідь на теоретичні запитання з деякими неточностями та вірно виконане практичне завдання (при наявності) - оцінка 70-89 балів;
- поверхова відповідь на теоретичне запитання та виконане практичне завдання без достатніх пояснень (при наявності) - оцінка 60-69 балів.

Незадовільно виставляється у тому випадку, якщо у здобувача освіти:

- поверхова відповідь на теоретичне запитання;
- відсутність будь-якої відповіді на теоретичне запитання,
- здобувач освіти набрав 59 і менше балів.

Критерії оцінки модульної контрольної роботи:

- Оцінку «відмінно» (90-100 % балів) одержує студент, який дав не менше 90 % правильних відповідей на стандартизовані тестові завдання, без помилок відповідей на письмові завдання.
- Оцінку «добре» (74-89 % балів) одержує студент, який дав не менше 74 % правильних відповідей на стандартизовані тестові завдання, припустився окремих незначних помилок у відповідях на письмові завдання.

- Оцінку «задовільно» (60-73 % бали) одержує студент, який дав не менше 60 % правильних відповідей на стандартизовані тестові завдання, припустився значних помилок у відповідях на письмові завдання.
- Оцінку «незадовільно» (0-59 % балів) одержує студент, який дав менше 60 % правильних відповідей на стандартизовані тестові завдання, припустився грубих помилок у відповідях на письмові завдання або не надав відповіді на поставлені перед ним письмові завдання.

Критерії оцінки підсумкового модуля (іспит):

- оцінку «відмінно» (90-100 балів, А) заслуговує студент, який: всебічно, систематично і глибоко володіє навчально-програмовим матеріалом; вміє самостійно виконувати завдання, передбачені програмою, використовує набуті знання і вміння у нестандартних ситуаціях; засвоїв основну і ознайомлений з додатковою літературою, яка рекомендована програмою; засвоїв взаємозв'язок основних понять дисципліни та усвідомлює їх значення для професії, яку він набуває; вільно висловлює власні думки, самостійно оцінює різноманітні життєві явища і факти, виявляючи особистісну позицію; самостійно визначає окремі цілі власної навчальної діяльності, виявив творчі здібності і використовує їх при вивченні навчально-програмового матеріалу, проявив нахил до наукової роботи.
- оцінку «добре» (82-89 балів, В) – заслуговує студент, який: повністю опанував і вільно (самостійно) володіє навчально-програмовим матеріалом, в тому числі застосовує його на практиці, має системні знання в достатньому обсязі відповідно до навчально-програмового матеріалу, аргументовано використовує їх у різних ситуаціях; має здатність до самостійного пошуку інформації, а також до аналізу, постановки і розв'язування проблем професійного спрямування; під час відповіді допустив деякі неточності, які самостійно виправляє, добирає переконливі аргументи на підтвердження вивченого матеріалу;
- оцінку «добре» (74-81 бал, С) заслуговує студент, який: в загальному роботу виконав, але при підсумковому контролі робить певну кількість помилок; вміє порівнювати, узагальнювати, систематизувати інформацію під керівництвом викладача, в цілому самостійно застосовувати на практиці, контролювати власну діяльність; опанував навчально-програмовий матеріал, успішно виконав завдання, передбачені програмою, засвоїв основну літературу, яка рекомендована програмою;
- оцінку «задовільно» (64-73 бали, D) – заслуговує студент, який: знає основний навчально-програмовий матеріал в обсязі, необхідному для подальшого навчання і використання його у майбутній професії; виконує завдання непогано, але зі значною кількістю помилок; ознайомлений з основною літературою, яка рекомендована програмою; допускає на

заняттях чи екзамені помилки при виконанні завдань, але під керівництвом викладача знаходить шляхи їх усунення.

- оцінку «задовільно» (60-63 балів, E) – заслуговує студент, який: володіє основним навчально-програмовим матеріалом в обсязі, необхідному для подальшого навчання і використання його у майбутній професії, а виконання завдань задовольняє мінімальні критерії. Знання мають репродуктивний характер. оцінка «незадовільно» (35-59 балів, FX) – виставляється студенту, який: виявив суттєві прогалини в знаннях основного програмового матеріалу, допустив принципові помилки у виконанні передбачених програмою завдань. □ оцінку «незадовільно» (0-34 балів, F) – виставляється студенту, який володіє навчальним матеріалом тільки на рівні елементарного розпізнавання і відтворення окремих фактів або не володіє зовсім; допускає грубі помилки при виконанні завдань, передбачених програмою; не може продовжувати навчання і не готовий до професійної діяльності після закінчення університету без повторного вивчення даної дисципліни.

6. ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

6.1. Зміст навчальної дисципліни

Змістовий модуль № 1 Загальні уявлення про хемометрію

Тема №1. Уявлення про хемометрію.

Предмет курсу. Історія становлення та розвитку хемометрії. Важливість предмету для різних галузей хімії та техніки. Розвиток хемометрії у світі. Уявлення про хімічну інформацію, аналітичний сигнал. Особливості вимірювання та інтерпретації результатів вимірювання в хімії. Хімічні величини, способи їх вираження та виміру.

Тема № 2. Джерела хімічної інформації.

Хімічні дані та інформація. Хімічні періодичні та неперіодичні видання. Квартиль, Імпакт-фактор, h-індекс Хірша журналів та науковців. Пошук інформації в Інтернет мережі, наукометричні бази даних SCOPUS та Web of Science. Некомерційні бази даних, Google Scholar або Google Академія. Тенденції розвитку сучасної хімічної науки.

Тема № 3. Основні положення теорії імовірностей.

Уявлення випадкового дослідження. Функції розподілу імовірностей та густини розподілу імовірностей. Важливі види розподілів, що зустрічаються в практиці – біноміальний, геометричний, Пуассонівський, нормальний (Гаусовський). Розподіл при обмеженій кількості повторних вимірювань, t-розподіл Стюдента. Одновимірні та багатовимірні випадкові величини, їх характеристики.

Змістовий модуль № 2 Хемометричні методи в хімії

Тема №4. Основи статистики.

Аналіз результатів вимірювань. Типи змінних. Характеристики вибірових випадкових величин. Характеристики багатомірних випадкових величин. Похибки. Точність та відтворюваність.

Тема №5. Метрологічні параметри вимірювань.

Важливі терміни. Як правильно інтерпретувати результати вимірювань в хімії. Невизначеність та похибка. Невизначеності типу А та Б. Правильність і точність, повторюваність та відтворюваність. Стандартні матеріали та зразки. Стандартні методи вимірювання. Незалежні, залежні, прямі, непрямі, арбітражні методи. Валідація та верифікація методів.

Тема № 6. Регресійний аналіз.

Метод найменших квадратів. Градувальна та калібрувальна функції. Оцінка лінійності моделі градувальної залежності. Регресійний аналіз для складніших моделей. Алгоритм регресійного аналізу. Планування досліджень. Кластерний аналіз. Використання в хімії.

6.2. Структура навчальної дисципліни

Назви змістових модулів і тем	Кількість годин					
	Усього	у тому числі				
		лекції	практичні (семінарські)	лабораторні	Індивідуаль- на робота	самостійна робота
Змістовий модуль № 1						
Тема №1. Уявлення про хемометрію. Предмет курсу. Історія становлення та розвитку хемометрії. Важливість предмету для різних галузей хімії та техніки. Розвиток хемометрії в світі.		1				5
Уявлення про хімічну інформацію, аналітичний сигнал. Особливості вимірювання та інтерпретації результатів вимірювання в хімії. Хімічні величини, способи їх вираження та виміру.		1				5
Тема № 2. Джерела хімічної інформації. Хімічні дані та інформація. Хімічні періодичні та неперіодичні видання. Квартиль, Імпакт-фактор, h-індекс Хірша журналів та науковців.		1		4		5
Пошук інформації в Інтернет мережі, наукометричні бази даних SCOPUS та Web of Science.		1		4		5
Тема № 3. Основні положення теорії імовірностей.		2				5
Модульна контрольна робота № 1		1		8		10
Разом за модуль № 1		7		8		35
Змістовий модуль № 2						
Тема №4. Основи статистики.		2		4		10

Тема №5. Метрологічні параметри вимірювань.		3		8		5
Тема № 6. Регресійний аналіз.		3		6		8
Модульна контрольна робота № 2		1				20
Разом за змістовий модуль № 2		9		18		43
Разом за підсумковий модуль		16		26		78

6.3. Теми лабораторних занять

№ з/п	Назва теми	Кількість Годин
1	Пошук інформації в Інтернет мережі, наукометричні бази даних SCOPUS та Web of Science. Презентації за науковою тематикою дипломної роботи. Підготувати 2 презентації на основі статей у міжнародних фахових журналах, які реєструються наукометричними базами Scopus чи Web of Science. Тематика статей має бути пов'язана з тематикою дипломної роботи.	4
2	Пошук інформації в Інтернет мережі, наукометричні бази даних SCOPUS та Web of Science. Характеристика рівня (науковості) міжнародних фахових журналів та вчених-хіміків. 2.1. Охарактеризувати рівень 3 міжнародних наукових журналів (видавець, країна, квартиль Q, імпакт-фактор IF, індекс Хірша) за наукометричними базами Web of Science та Scopus. 2.2. Охарактеризувати впливовість 3 вчених (імя, установа, країна, загальна кількість публікацій, загальна кількість цитувань, індекс Хірша) за наукометричними базами Web of Science, Scopus та Google Scholar.	4
3	Вимірювання рН реальних зразків вод (природна, питна, річкова, стічна вода і т.п.) потенціометричним методом. Статистична обробка результатів вимірювань. Випадкова похибка, оцінка випадкової похибки. Розрахунок типових задач.	4

4	Визначення вмісту купруму у вигляді аміачного комплексу спектрофотометричним методом. Статистична обробка результатів вимірювань. Оцінка промаху (грубої похибки) за тестами Діксона за Граббса. Розрахунок типових задач.	4
5	Хроматометричне та потенціометричне визначення вмісту феруму у модельних зразках титруванням з індикатором дифеніламіном та Pt-електродом. Побудова кривої потенціометричного титрування. Статистична обробка результатів вимірювань. Порівняння двох методів. Систематична похибка, оцінка систематичної похибки. Розрахунок типових задач. Розрахунки систематичної похибки порівнянням з референтним значенням величини (константою) та зі значенням величини, отриманим референтним (стандартним) методом.	6
6	Визначення аніонних поверхнево-активних речовин у водах спектрофотометричним методом. Регресійний аналіз - побудова і оцінка градувальної залежності (рівняння прямої) за методом найменших квадратів розрахунком за формулами та за допомогою програми Excel (рівняння прямої, коефіцієнт кореляції, коефіцієнти рівняння, інтервал достовірності коефіцієнтів у рівнянні прямої). Порівняння отриманих результатів. Розрахунок типових задач.	4
Разом		26

6.4. Самостійна робота

№	Назва теми	Кількість годин
1	Підготовка до лабораторних занять – теоретична підготовка та обробка отриманих результатів експерименту	16
2	Підготовка до написання модульних контрольних робіт	30
3	Довірчий інтервал для математичного очікування.	8

4	Статистичні гіпотези. Перевірка гіпотез.	8
5	Метод найменших квадратів. Розрахунок рівняння градувального графіку.	6
6	Візуалізація даних. Побудова графіків двовимірних експериментальних залежностей.	10
	Разом	78

7. ІНСТРУМЕНТИ, ОБЛАДНАННЯ ТА ПРОГРАМНЕ ЗАБЕЗПЕЧЕННЯ, ВИКОРИСТАННЯ ЯКИХ ПЕРЕДБАЧАЄ НАВЧАЛЬНА ДИСЦИПЛІНА

Реактиви, обладнання та матеріали згідно плану лабораторних робіт з курсу.

Обладнання: спектрофотометр, потенціометр рН – метр, скляний електрод, хлорид-срібний електрод порівняння (або комбінований рН – електрод).

Мультимедійний проектор, персональний комп'ютер.

Програмне забезпечення пакету Microsoft Office для підготовки презентацій та обробки цифрових даних, система електронного навчання Moodle. Таблиці довідкових величин і констант.

8. РЕКОМЕНДОВАНІ ДЖЕРЕЛА ІНФОРМАЦІЇ

Основна література

1. Базель Я.Р., Воронич О.Г., Шкумбатьок Р.С., Русин В.М. Методичні вказівки для виконання лабораторних робіт з навчальної дисципліни Основи хімічної метрології. Друге, перероблене видання. – Ужгород: Вид-во УжНУ «Говерла», 2023. – 56 с.
2. Супрунович С. В., Кормош Ж. О., Сливка Н. Ю. Статистичні та хемометричні методи в хімії: Навчальний посібник для студентів вищих навчальних закладів. Луцьк: ВНУ імені Лесі Українки, 2022. 210 с.

Додаткова література

3. Massart D. L., Vandeginste B. G. M., Deming S. M., Michotte Y., Kaufman L. Chemometrics: a textbook. Amsterdam: Elsevier. 2003. 477 P.
4. Otto M. Chemometrics: Statistics and Computer Application in Analytical Chemistry. Wiley-VCH. 2024. 403 P.
5. Неділько С.А. Математичні методи в хімії. Київ: Либідь, 2005. 256 с.
6. Пушкарьова Я. М., Зайцева Г. М., Калібабчук В. О. Основи хімічної метрології. Практикум – Київ: НМУ імені О. О. Богомольця, 2016. 28 с.
7. Skok A., Bazel Y., Fizer M. A Simple Green Method for the Determination of Hydrogen Peroxide and Fe(III)/Fe(II) Species Based on Monitoring the Decolorization Process of Polymethine Dye Using an Optical Immersion Probe. Chemosensors 2024, 12, 270. <https://doi.org/10.3390/chemosensors12120270>
8. Skok A., Vishnikin A., Bazel Y., Toth J. Determination of Rhodamine 6G with direct immersion single-drop microextraction combined with an optical probe. PLoS ONE 19(8) (2024) e0309121. <https://doi.org/10.1371/journal.pone.0309121>
9. Kakalejčiková S., Bazel' Y., Thi Van Anh Le, Fizer M. An innovative vortex-assisted liquid-liquid microextraction approach using deep eutectic solvent: application for the spectrofluorometric determination of Rhodamine B in water, food and cosmetic samples. Molecules. 29(14), (2024) 3397. <https://doi.org/10.3390/molecules29143397>
10. Kakalejčikova S., Bazel Y. A combination of vortex-assisted liquid–liquid microextraction with fluorescence detection: An innovative approach for a green and highly sensitive determination of sodium dodecyl sulfate in water samples and pharmaceuticals. Microchemical Journal 199 (2024) 110226. <https://doi.org/10.1016/j.microc.2024.110226>
11. Brereton R.G., Jansen J., Lopes J., et al. Chemometrics in analytical chemistry - part I: Anal Bioanal Chem. 409 (2017) 5891-5899. Chemometrics in analytical chemistry - part II: modeling, validation, and applications. Anal Bioanal Chem. 410 (2018) 6691–6704.