

Рекомендована література

Основна література

1. Холин Ю.В. Количествоенный физико-химический анализ комплексообразования в растворах и на поверхности химически модифицированных кремнеземов: содержательные модели, математические методы и их приложения. – Харьков: *Фолио*, 2000. – 288 с.
2. Холин Ю.В., Никитина Н.А., Пантелеймонов А.В., Решетняк Е.А., Бугаевский А.А., Логинова Л.П. Метрологические характеристики методик обнаружения с бинарным откликом. – Харьков: *Тимченко*, 2008. – 128 с.
3. Иванов В. В., Слета Л. А.. Квантовая химия.– Харьков: “*Фолио*”, 2007. – 443 с.
4. Иванов В.В., Слета Л.А., Расчетные методы прогноза биологической активности органических соединений. – Харьков: ЧП *Азамаев В.Р.*, 2003.– 76 с.
5. Орлов В.Д., Липсон В.В., Иванов В.В. Медицинская химия. – Харьков: “*Фолио*”, 2005. – 461 с.

Допоміжна література

1. Huber P. Robust statistical procedures, in: CBMS-NSF Regional conf. series in appl. mathematics, SIAM, Philadelphia, 1996.
2. Родионова О.Е. Хемометрика: достижения и перспективы / О.Е. Родионова, А.Л. Померанцев // Успехи химии. – 2006. – Т. 75, № 4. – С. 302-321.
3. Wold S. Chemometrics: what do we mean with it, and what do we want from it? // Chemom. Intell. Lab. Syst. – 1995. – V. 30, No 1. – P. 109-115.
4. Massart D.L., Vandeginste B.G.M., Buydens L.M.C., de Jong S., Lewi P.J., Smeyers-Verbeke J. Handbook of Chemometrics and Qualimetrics: Part A. Amsterdam: Elsevier, 1997. – 886 p.
5. R.G. Brereton. Chemometrics: Data Analysis for the Laboratory and Chemical Plant , Wiley, Chichester, January 2003, 489 p.
6. Нейман Ю. Вводный курс теории вероятностей и математической статистики. – М.: Наука, 1968. – 448 с.
7. Вершинин В.И., Дерендейев Б.Г., Лебедев К.С. Компьютерная идентификация органических соединений. – М.: Академкнига, 2002. – 197 с.
8. Дрейпер Н., Смит Г. Прикладной регрессионный анализ: В 2-х кн.
9. Young D.C. Computational Chemistry, Wiley Interscience, New York, 2001. 370 р.
10. Станкевич М.И., Станкевич И.В., Зефиров Н.С., Топологические индексы в органической химии // Успехи химии.–1988.–Т. 57, № 3.– С.337-365.
11. Раевский О.А., Дескрипторы молекулярной структуры в компьютерном дизайне биологически активных веществ // Успехи химии.–1999.–Т. 68, №6. – С. 555-575.
12. Факторный, дискриминантный и кластерный анализ, М.”Финансы и статистика”, 1989, 213 с.

Посилання на інформаційні ресурси в Інтернеті, відео-лекції, інше методичне забезпечення

Інформаційні ресурси

1. Файл-сервер хімічного факультету ХНУ імені В.Н. Каразіна:
<http://www-chemistry.univer.kharkov.ua/uk>
2. Сайт кафедри хімічного матеріалознавства
<http://www-chemo.univer.kharkov.ua/>