فراه علمی-څېړنیز ژورنال Vol: 3, Issue: 2 year:2026, 1448, 1405

په تحلیلي کیمیا کې د مصنوعي ځیرکتیا اخلاقي اغېزو مروري څېړنه: فرصتونه، ننګونې او راتلونکي لیدلوري

پوهنمل حسیب الله ایازی[1*]، پوهنیار نجیب الله بلوچ[2]
کیمیا څانګه، ښوونې او روزنې پوهنځی، فراه پوهنتون
ایمیل: ayazihaseeb1402@farau.edu.af

لنډیز

مصنوعي ځیرکتیا په وروستیو کلونو کې د تحلیلي کیمیا په ډګر کې د یوه نوښتګر او بدلون راوستونکي ځواک په توګه راڅرګنده شوې ده. د معلوماتو د چټک تحلیل، د کیمیاوي پروسو د غوره کولو، د پایلو د وړاندوینې او د علمي موندنو د چټکتیا له امله د مصنوعي ځیرکتیا کارونه په تحلیلي کیمیا کې په بې ساري ډول زیات شوې دي. خو له دې سره سره له ګڼو اخلاقي پوښتنو او ننګونو سره مل دي چې د علمي مسؤلیت، شفافیت او ټولنیز خوندیتوب له پلوه جدي پاملرنې ته اړتیا لري. د دې څېړنې اساسي مسئله دا ده چې په تحلیلي کیمیا کې د مصنوعي ځیرکتیا د پراخې کارونې اخلاقي اغېزې، احتمالي خطرونه او مسؤلیتونه په کافي اندازه نه دي ارزول شوي. له همدې امله، د څېړنې موخه دا ده چې د مصنوعي ځیرکتیا د کارونې مهم اخلاقي ابعاد، فرصتونه، ننګونې او راتلونکې اغېزې وڅېړي او د مسؤلانه او خوندي کارونې لپاره علمي لیدلوری وړاندې کړي. څېړنه په کتابتوني او مروریزې کړنلارې ولاړه ده، چې د موضوع اړوند (۴۳) علمي مقالې، نړیوالو اخلاقي چوکاټونه او معتبرې علمي سرچینې چې کلنۍ محدوده یې له ۲۰۱۵ تر ۲۰۲۶ پورې وه، کتل شوې او معلومات یې په تحلیلي او انتقادي ډول ارزول شوي دي. د څېړنې موندنې ښیي چې مصنوعي ځیرکتیا کولی شي د تحلیلي کیمیا دقت، چټکتیا او اغېزمنتیا لوړه کړي؛ خو ورسره د معلوماتو د تعصب، شفافیت د نشتون، حساب ورکونې، فکري ملکیت، امنیتي خطرونو او ناوړه استفادې په څېر اخلاقي ننګونې هم رامنځته کوي. د دې مروري څېړنې تمرکز په تحلیلي کیمیا کې د مصنوعي ځیرکتیا د کارونې اخلاقي اغېزو، فرصتونو، ننګونو او د مسوولانه راتلونکي پلي کېدو پر لیدلوری دی.

کلیدي کلمې: مصنوعي ځیرکتیا، تحلیلي کیمیا، اخلاقي اغیزې، علمي مسئولیت، شفافیت او حساب ورکونه

A Review of the Ethical Implications of Artificial Intelligence in Analytical Chemistry: Opportunities, Challenges, and Future Perspectives

Hasibullah Ayazi, Najibullah Balooch

Abstract

Artificial intelligence (AI) has emerged in recent years as an innovative and transformative force in the field of analytical chemistry. Owing to its capacity for rapid data analysis, optimization of chemical processes, prediction of analytical outcomes, and acceleration of scientific discoveries, the application of AI in analytical chemistry has increased unprecedentedly. Nevertheless, its expanding use is accompanied by numerous ethical questions and challenges that require serious consideration from the perspectives of scientific responsibility, transparency, and societal safety. The central issue of this study is that the ethical implications, potential risks, and associated responsibilities arising from the extensive application of AI in analytical chemistry have not been sufficiently evaluated. Therefore, the objective of this study is to examine the major ethical dimensions, opportunities, challenges, and future implications of AI applications and to provide a scientific perspective for their responsible and safe utilization. The study adopts a bibliographic and review-based approach, in which 43 scientific articles, international ethical frameworks, and credible scholarly sources published within the period from 2015 to 2026 were reviewed, and the available information was critically and analytically evaluated. The findings indicate that AI can enhance the accuracy, speed, and effectiveness of analytical chemistry; however, it also gives rise to ethical challenges, including data bias, lack of transparency, accountability, intellectual property concerns, security risks, and potential misuse. This review focuses on the ethical implications, opportunities, challenges, and perspectives for the responsible future implementation of AI in analytical chemistry.

Keywords: Artificial intelligence, analytical chemistry, ethical implications, scientific responsibility, transparency and accountability.

سریزه

الحمدلله رب العالمين و الصلاة و السلام على سيدنا محد و على آله و صحبه اجمعين. بې‌پایه حمد او ثنا د هغه متعال خدای لپاره ده چې انسان يې په علم ونازاوه او د نړۍ د پېژندنې او آبادۍ لارې يې ورته پرانیستې. درود او سلام دې وي پر حضرت محمد مصطفی ﷺ، چې د علم، هدايت او رحمت پیغام راوړونکی دی او د هغه پر درنو آل او اصحابو دې هم وي.

د یوویشتمې پېړۍ په وروستیو لسیزو کې مصنوعي ځیرکتیا د علم او ټکنالوژۍ په بېلابېلو برخو، په ځانګړي ډول تحليلي کیمیا کې، د څېړنې او معلوماتو د تحلیل لارې بدلې کړې دي. دا ټکنالوژي د سپیکټروسکوپي، کروماتوګرافي، کیمیاوي سنسرونو او لویو معلوماتي ټولګو په چټک او دقيق تحلیل، د کیمیاوي ځانګړتیاوو په وړاندوینه، د تجربوي پروسو په غوره کولو او د نوو تحليلي میتودونو په پراختیا کې مهم رول لري(Rial, 2024). سره له دې چې مصنوعي ځیرکتیا په تحليلي کیمیا کې د پام وړ فرصتونه رامنځته کړي، پراخه کارونه يې د معلوماتو تعصب، د الګوریتمونو د شفافیت او تفسیر وړتیا، د علمي پربکړو اعتبار، فکري ملکیت، د معلوماتو محرمیت، حساب‌ورکونې او ناوړه استفادې په اړه مهمې اخلاقي اندېښنې راپورته کړې دي. د UNESCO د مصنوعي ځیرکتیا د اخلاقو سپارښتنه ټینګار کوي چې د AI سیستمونه باید د بشري کرامت، عدالت، شفافیت، مسؤلیت او انساني څارنې له اصولو سره سمون ولري، څو ټولنیزې ګټې خوندي او احتمالي زیانونه محدود شي (UNESCO, 2021).

د موضوع علمي اهمیت څکه لوړ دی چې مصنوعي ځیرکتیا د تحليلي کیمیا د معلوماتو د تولید او تحلیل لارې بدلوي؛ نو د هغې اخلاقي کارونه د علمي اعتبار، ټولنیز مسؤلیت، انساني باور او پایدار علمي نوښت لپاره مهم دي. د دې موضوع څېړنه کولی شي د مصنوعي ځیرکتیا د مسؤلانه کارونې علمي او اخلاقي چوکاټونو په پیاوړتیا کې مرسته وکړي.

په تحليلي کیمیا کې د مصنوعي ځیرکتیا تخنیکي او تطبیقي اړخونه نسبتاً ډېر څېړل شوي؛ خو د دې ټکنالوژۍ د اخلاقي اغېزو په اړه لا هم د علمي ادبیاتو په ډګر کې د پام

وړ تشه موجوده ده. ډېری څېړنې د فعاليت، دقت او نوښت پر تخنيکي ګټو تمرکز کوي، په داسې حال کې چې د اخلاقي مسؤليت، د خطر مديريت، علمي شفافيت او د انساني څارنې اړخونه لږ تر بحث لاندې نيول شوي دي (Rial, 2024). له بلې خوا، وروستي علمي بحثونه څرګندوي چې د مصنوعي ځيرکتيا راتلونکې پرمختګ بايد يوازې د تخنيکي اغېزمنتيا پر بنسټ ونه ارزول شي، بلکې د اخلاقي پايلو، ټولنيز عدالت او مسؤلانه علمي نوښت له زاويې څخه هم ورته پاملرنه وشي (Nowak, 2026). وروستيو څېړنو ښودلې چې په کيميا او په ځانګړي ډول تحليلي کيميا کې د AI تر ټولو لويه ننګونه نور دقت نه دی، بلکې د پايلو د تشريح، د پرېکړو د منطق د روښانتيا او د علمي باور وړتيا مسئله ده. (Wellawatte & Schwaller, 2025; Contreras & Bocklitz, 2025) همدارنګه وروستيو علمي ارزونو ښودلې چې د تحليلي کيميا په برخه کې د AI د چټک پرمختګ ترڅنګ د معلوماتو کيفيت، الګوريتمي تعصب، د معلوماتو محرميت، د فکري ملکيت حقونه او د علمي مسؤوليت مسئلې د اخلاقي بحثونو اساسي محورونه ګرځېدلي دي. (Rial, 2024; Hussain et al., 2025).

له بلې خوا يوه څېړنه څرګندوي چې د معلوماتو د معياري کولو نشتوالی، د څېړنو د بيا تکرار ستونزې او د معلوماتو د شفافيت کمښت د AI پر بنسټ کيمياوي څېړنو د اعتبار لپاره جدي خنډونه دي(Schrader et al., 2024). سربېره پر دې، په ۲۰۲۵ کال کې د تحليلي کيميا مجلې يوه مهمه مقاله AI د علمي مرستيال په توګه معرفي کوي او استدلال کوي چې مصنوعي ځيرکتيا اوس د مقالو ليکلو، ارزونې، علمي خپرونو او څېړنيزو پرېکړو په بهير کې داخل شوې ده. له همدې امله د انساني څارنې، اخلاقي حساب ورکونې او علمي امانتدارۍ اړتيا تر بل هر وخت زياته شوې ده(Fuente-Ballesteros et al., 2025).

يو شمېر نوې څېړنې خبرداری ورکوي چې AI هم د علمي پرمختګ فرصت دی او هم د علمي امانتدارۍ لپاره خطر. د AI له خوا د متن توليد، د معلوماتو ناسم تفسير او د څېړنيزو پايلو غيرانتقادي کارونه د علمي صداقت لپاره جدي ننګونې بلل شوي دي(Yabalak, 2025).

سره له دې چې د تحليلي کيميا کې د مصنوعي ځيرکتيا تخنيکي ګټې پراخې څېړل شوې، خو د هغې اخلاقي اغېزې، شفافيت، محرميت، الګوريتمي تعصب او علمي

حساب‌ورکونه لا هم مهمه علمي تشه ده. سربېره پر دې، دAI تحليلي دقت له لوړولو سره د انرژۍ او ضايعاتو کمولو او د پايدارو کيمياوي پروسو د رامنځته کولو لپاره هم مهم ظرفيت لري(Yadav et al., 2025).

د همدې ستونزې د څېړلو لپاره د دې مقالې اساسي موخه دا ده، چې په تحليلي کيميا کې د مصنوعي ځيرکتيا اخلاقي اغېزې، فرصتونه، ننګونې او راتلونکي ليدلوري په ژوره او انتقادي بڼه وارزوي. فرعي موخې يې د اخلاقي خطرونو پېژندنه، د شفافيت او حساب ورکونې د اهميت ارزونه، د تشريح وړ مصنوعي ځيرکتيا رول تحليل او د مسؤلانه او انسان‌محورې کارونې لپاره د مناسب علمي چوکاټ وړاندې کول دي.

د څېړنې د موخو د تحقق لپاره لاندې پوښتنې مطرح کېږي:

١. په تحليلي کيميا کې د مصنوعي ځيرکتيا تر ټولو مهمې اخلاقي اغېزې کومې دي؟

٢. د معلوماتو محرميت، الګوريتمي تعصب او د فکري ملکيت حقونه د AI پر بنسټ تحليلي سيستمونو کې کومې ننګونې رامنځته کوي؟

٣. د مصنوعي ځيرکتيا مسؤلانه او اخلاقي کارونې لپاره کوم نړيوال اصول او چوکاټونه تر ټولو اغېزمن ګڼل کېږي؟

٤. د تحليلي کيميا په راتلونکو پرمختګونو کې د اخلاقي څارنې او انساني مداخلې رول څه دی؟

دا څېړنه د کتابتونيزې او تحليلي ـ انتقادي ميتودولوژۍ پر بنسټ ترسره شوې ده. د موضوع اړوند معلومات د معتبرو علمي ژورنالونو، علمي کتابونو، نړيوالو اخلاقي چوکاټونو او وروستيو څېړنيزو مقالو څخه راټول شوي او بيا د تحليلي او مقايسوي روش له لارې ارزول شوي دي. د څېړنې تمرکز په هغو ادبياتو دی چې د ۲۰۱۵–۲۰۲۶ کلونو ترمنځ د تحليلي کيميا او مصنوعي ځيرکتيا د اخلاقي اړخونو په اړه خپاره شوي دي.

د څېړنې ميتودولوژي

د دې مروري څېړنې لپاره اړوندې علمي سرچينې په Web of Science ، Scopus، PubMed، ScienceDirectاو Google Scholar ډيټابيسونو کې د اړوندو کليدي کلمو له لارې لټول شوې، د موضوع سره مستقيم تړاو لرونکي معتبر مطالعات او اسناد غوره شوي، کيفيت يې ارزول

شوی او د مصنوعي ځیرکتیا د کارونې، اخلاقي مسئلو، فرصتونو، ننګونو او راتلونکو لیدلوریو اړوند معلومات په موضوعاتي ډول تحلیل شوي دي.

نظري او مفهومي چوکاټ

د تحلیلي کیمیا بنسټیز مفاهیم

تحلیلي کیمیا د کیمیا بنسټیزه څانګه ده چې د موادو د پېژندنې، کیفي او کمي تحلیل او دقیقې اندازه‌ګیرۍ لپاره علمي بنسټ برابروي. د دې علم معلومات په څېړنه، صنعت، چاپېریال او طب کې د باور وړ تحلیلونو او علمي پرېکړو لپاره اساسي اهمیت لري (Harris, 2020). تحلیلي کیمیا د کیمیا بنسټیزه څانګه ده چې د موادو د پېژندنې، کیفي او کمي تحلیل او دقیقې اندازه‌ګیرۍ لپاره علمي بنسټ برابروي. د دې علم معلومات په څېړنه، صنعت، چاپېریال او طب کې د باور وړ تحلیلونو او علمي پرېکړو لپاره اساسي اهمیت لري (Skoog et al., 2018). همدا پرمختګونه د لویو معلوماتو د تولید لامل شوي چې د هغوی د تحلیل لپاره پرمختللو محاسبوي میتودونو ته اړتیا رامنځته شوې ده.

په معاصر علمي چاپېریال کې د تحلیلي کیمیا او مصنوعي ځیرکتیا ادغام د کروماتوګرافي، سپیکټروسکوپي او کتلوي سپیکټرومټري له لارې د تولیدېدونکو پېچلو معلوماتو د چټک او دقیق تحلیل لپاره مهم شوی دی. د ماشین زده‌کړې او مصنوعي ځیرکتیا تخنیکونه د نمونو پېژندنې، وړاندوینې او اتومات تحلیل په برخه کې د تحلیلي پایلو دقت، سرعت او تکرارپذیري لوړوي؛ خو په ورته وخت کې د معلوماتو کیفیت، شفافیت، د الګوریتمونو تفسیر او علمي مسؤلیت په اړه نوې پوښتنې هم رامنځته کوي (Ayres et al., 2021).

د تحلیلي کیمیا او مصنوعي ځیرکتیا ادغام د پېچلو معلوماتو تحلیل، د نمونو پېژندنه، وړاندوینه، کیفیت کنټرول او د تجربوي پروسو اتومات کول اسانه کړي دي (Ayres et al., 2021). دې پرمختګونو د تحلیلي پایلو سرعت، اعتبار او تکرارپذیري لوړه کړې، خو د معلوماتو کیفیت، الګوریتمي شفافیت او د پرېکړو د تشریح وړتیا لا هم مهمې ننګونې دي. له همدې امله، تحلیلي کیمیا د معلوماتو-محور علم پر لور د پرمختګ ترڅنګ د اخلاقي مسؤلیت، شفافیت او علمي حساب‌ورکونې لا زیاتې اړتیاوې رامنځته کوي.

مصنوعي ځيرکتيا

مصنوعي ځيرکتيا هغو محاسبوي سيستمونو ته ويل کېږي چې د انسان د زده‌کړې، استدلال، پرېکړې او ستونزو د حل وړتياوې تقليدوي. د لويو معلوماتو، پياوړو محاسبوي وړتياوو او ژورو عصبي شبکو له پراختيا سره يې په وروستيو کلونو کې چټک پرمختګ کړی دی. مصنوعي ځيرکتيا عموماً په محدودې، عمومي او فوق‌العاده مصنوعي ځيرکتيا وېشل کېږي، چې له دې ډلې محدوده مصنوعي ځيرکتيا د معلوماتو تحليل، پېژندنې او وړاندوينې په څېر ځانګړو دندو کې تر ټولو پراخه کارول کېږي(Russell & Norvig, 2021). د ماشين زده‌کړه او ژوره زده‌کړه د همدې برخې مهمې ځانګې دي چې د تحليلي کيميا په ګډون په ګڼو علمي برخو کې کارول کېږي.

د مصنوعي ځيرکتيا د پراخ استعمال له امله اخلاقي ارزونه ځانګړې اهميت پيدا کړی، چې د کړنو د ارزونې لپاره دندويي، پايله‌محوره او فضيلت‌محوره اخلاقي نظريې مهم چوکاټونه وړاندې کوي. دندويي اخلاق د Immanuel Kant له نظرياتو سره تړاو لري او پر دندو او اصولو ټينګار کوي؛ پايله‌محوره اخلاق، چې د Jeremy Bentham او John Stuart Mill له افکارو اغېزمن دي، د کړنو ارزښت د پايلو له مخې سنجوي؛ او فضيلت‌محوره اخلاق، چې له Aristotle څخه سرچينه اخلي، پر شخصيتي ځانګړنو او اخلاقي فضيلتونو تمرکز کوي (Beauchamp & Childress, 2019). د مصنوعي ځيرکتيا د اخلاقي ارزونې په برخه کې دا نظريات د شفافيت، عدالت، حساب ورکونې او مسؤليت د اصولو د تحليل لپاره مهم مفهومي بنسټونه برابروي.

شکل ۱: په تحلیلي کیمیا کې د AI تخنیکونو طبقه بندۍ فیلوچارت (Adadi & Berrada., 2018)

په علمي څېړنو کې اخلاق د پوهې د اعتبار، څېړنیزې بشپړتیا او ټولنیز باور بنسټ جوړوي، چې رښتینولي، روڼتیا، بې‌طرفي، مسؤلیت او علمي امانتداري یې مهم اصول دي. د مصنوعي ځیرکتیا له پراخ استعمال سره د څېړنیزو اخلاقو ساحه هم پراخه شوې او د معلوماتو محرمیت، الګوریتمي تعصب، د اتومات پرېکړو مسؤلیت او د معلوماتو مالکیت یې مهمې نوې مسئلې ګرځېدلې دي (Resnik, 2020).که چېرې مصنوعي ځیرکتیا د نامناسبو یا متعصبو معلوماتو پر بنسټ ورروزل شي، نو پایلې یې کولی شي د علمي اعتبار، ټولنیز عدالت او بشري حقونو لپاره جدي ستونزې رامنځته کړي. د تحلیلي کیمیا پرمختګونو د مصنوعي ځیرکتیا ادغام ته زمینه برابره کړې، چې راتلونکې به یې د پرمختللو الګوریتمونو، هوښیارو سیستمونو او اخلاقي ډیجیټلي چوکاټونو له علمي او ټولنیزو اغېزو سره تړلې وي.

په تحليلي کيميا کې د مصنوعي ځيرکتيا د پرمختګ تاريخي بهير

د مصنوعي ځيرکتيا (AI) او تحليلي کيميا اړيکه د کيمومتريکس او پرمختللو احصائيوي ميتودونو له پراختيا سره رامنځته شوه او د معلوماتي ټکنالوژۍ او محاسبوي ظرفيتونو په پرمختګ سره يې چټکه وده وکړه. AI د سپېکټروسکوپي، کروماتوګرافي او کتلوي سپېکټرومتري په څېر تخنيکونو له لارې د توليدېدونکو لويو معلوماتي زېرمتونونو په لوړ دقت او سرعت تحليل، تفسير او وړاندوينه کې مهم رول لري، چې د علمي پرېکړو کيفيت او د پېچلو کيمياوي پديدو پوهه يې ښه کړې ده. (Ayres et al., 2021) د AI کارونه اوس هوښيارو لابراتواري سيستمونو، اتومات ازمايښتي پروسو او معلوماتي تصميم نيونې ته هم پراخ شوي دي (۱- جدول). له همدې امله، د دې ټکنالوژۍ له پراختيا سره د معلوماتو کيفيت، روڼتيا، حساب‌ورکونې، علمي اعتبار او اخلاقي مسؤليت اهميت هم زيات شوی، او د تحليلي کيميا راتلونکی د باور وړ، شفافو او اخلاقي چوکاټونو له رامنځته کولو سره تړاو لري. (Rial, 2024)

۱- جدول: د تحليلي کيميا په برخه کې د مصنوعي ځيرکتيا د پرمختګ تاريخي پړاوونه

موده	غالب څېړنيز محور
2000 – 2010	کيمومتريکس (Chemometrics) او د نمونو پېژندنه (Pattern Recognition)
2010 – 2020	ماشيني زده کړه (Machine Learning) او د معلوماتو کان‌کېندنه (Data Mining)
2020 – 2024	ژوره زده کړه (Deep Learning) و نيمه‌خپلواکه تحليلي سيستمونه (Autonomous Analysis)
2024 – 2026	تشريح کېدونکې مصنوعي ځيرکتيا (Explainable AI)، د AI اخلاق، FAIR ډېټا او د حاکميت چوکاټونه (Governance Frameworks)

(Ayres et al., 2021؛ Rial, 2024)

سره له دې چې مصنوعي ځيرکتيا په تحليلي کيميا کې د معلوماتو تحليل، وړاندوينې او اتومات کولو مهم فرصتونه برابروي، خو شفافيت، حساب‌ورکونه، محرميت او علمي

صداقت یې مهمې اخلاقي ننګونې دي؛ نو د مسئولانه او دوامدار تطبیق لپاره یې ارزونه اړینه ده.

په تحلیلي کیمیا کې د مصنوعي ځیرکتیا کارونې

مصنوعي ځیرکتیا په تحلیلي کیمیا کې د لویو او پېچلو معلوماتو د تحلیل او ماډلینګ بهیر بدل کړی دی. د ماشین زده‌کړې او ژورو عصبي شبکو په مرسته د کتلوي سپیکټرومتري، NMRاو سپیکټروسکوپیک معلوماتو څخه د پټو نمونو او اړیکو استخراج، د کیمیاوي ځانګړنو وړاندوینه، د نمونو طبقه‌بندي او د غیرعادي معلوماتو پېژندنه اسانه شوې ده. دغو پرمختللو میتودونو د تحلیلي پایلو دقت، سرعت او تکرارپذیري لوړه او د معلوماتو پر بنسټ د پرېکړو وړتیا پیاوړې کړې ده .(Ayres et al., 2021; Talanta, 2024).

سپیکټروسکوپي او کروماتوګرافي هغه برخې دي چې پکې د مصنوعي ځیرکتیا اغېز په ځانګړي ډول څرګند دی. دIR ، Raman، UV-Vis، NMRاو کتلوي سپیکټرومتري سپیکټرا معمولاً پېچلي او څو بعدي معلومات تولیدوي چې تفسیر یې د لوړې تخصصي پوهې غوښتنه کوي. مصنوعي ځیرکتیا د سپیکټرل معلوماتو د پروسس، د شور (Noise) د کمولو، د سیګنالونو د جلاکولو او د موادو د اتومات پېژندنې لپاره کارول کېږي. په کروماتوګرافي کې هم د ساتنې وخت(Retention Time)، د پیکونو پېژندنې او د جداسازۍ د شرایطو د مطلوب کولو لپاره د ماشین زده‌کړې ماډلونه کارول کېږي. دا نوښتونه د تحلیل دقت زیاتوي او د تجربوي پروسو وخت او لګښت کموي(Hashemi & Kaykhaii, 2026; Talanta, 2024) .

په سپیکټروسکوپي او کروماتوګرافي کې د مصنوعي ځیرکتیا ادغام د پېچلو او لوړابعاده معلوماتو د تحلیل، د مرکبونو د پېژندنې او د جوړښتي ځانګړنو د وړاندوینې لپاره مهم پرمختګ بلل کېږي. د ماشین زده‌کړې او ژورو عصبي شبکو ماډلونو په ځانګړي ډول د سپیکټروسکوپیک معلوماتو د طبقه‌بندۍ او د نامعلومو مرکبونو د چټکې پېژندنې په برخه کې د پام وړ دقت ښودلی دی .(Vaucher et al., 2024; Lu et al., 2024) همدارنګه، دAI د رامان او انفرارید سپیکټروسکوپي د معلوماتو د شور کمولو، ځانګړنو استخراج او اتومات طبقه‌بندۍ لپاره کارول کېږي، په داسې حال کې چې تشریح کېدونکې مصنوعي ځیرکتیا د

الګوریتمونو د پرېکړو د منطق د روښانه کولو او د علمي پایلو د شفافیت د ساتلو لپاره مهمه ده (Contreras & Bocklitz, 2025).

۲ شکل . د تحلیلي کیمیا په بهیر کې د مصنوعي ځیرکتیا د کارونې مفهومي کاري بهیر

په کروماتوګرافي کې مصنوعي ځیرکتیا د پیکونو د پېژندنې، د ساتنې وخت (Retention Time) د وړاندوینې، د مرکبونو د کمیتي تحلیل او د جداسازی د شرایطو د مطلوبولو لپاره کارول کېږي. د ۲۰۲٤ او ۲۰۲٥ کلونو څېړنې ښیي چې د ماشین زده‌کړې ماډلونه د کروماتوګرافیک جلاوالي د کیفیت وړاندوینه کولای شي او حتی د تجربې تر ترسره کېدو وړاندې د مناسب

ستون(Column)، متحرک فاز او عملیاتي شرایطو په ټاکلو کې مرسته کوي. دا چاره د تجربو شمېر، وخت او لګښت په څرګند ډول راکموي(Rial, 2024).

د NMR سپیکټروسکوپي په برخه کې هم مصنوعي ځیرکتیا د کیمیاوي شیفټونو د وړاندوینې، د سپیکټرم د سمون، د مخلوطو نمونو د تحلیل او د میتابولومیکس څېړنو لپاره کارول کېږي. وروستي علمي راپورونه څرګندوي چې AI د کوچنیو مالیکولونو د جوړښت تشخیص او د بیولوژیکي سیستمونو د پېچلو معلوماتو تحلیل په برخه کې د پام وړ پرمختګ رامنځته کړی دی (Kuhn et al., 202).

په ۲۰۲۵ کال کې Generative AI او مصنوعي معلوماتو تولید د سپیکټروسکوپیک معلوماتو د کمښت د جبران او د روزنیزو ډیټابېسونو د کیفیت د لوړولو لپاره مهم پرمختګونه رامنځته کړي، او بنسټیز ماډلونه، ځوماډلي زده کړه او خودمختاره لابراتوارونه د دې برخې راتلونکی لا پیاوړی کوي. د AI او ژورو زده‌کړو شبکو په مرسته د رامان، انفرارید او کتلوي سپیکټرومتري معلوماتو له لارې د نامعلومو مرکبونو د جوړښت او ځانګړنو وړاندوینه او د موادو پېژندنه چټکه شوې ده (۲-جدول).(Pan et al., 2021; Talanta, 2024).

۲- جدول: د تحلیلي کیمیا مهم تخنیکونه او د مصنوعي ځیرکتیا کارونې

تحلیلي تخنیک	د AI استعمال	مهمه ګټه	مأخذ
انعکاسي ایکس وړانګې فلورسانس	طبقه بندي	د عناصرو پېژندنه او د موادو طبقه‌بندي	(Artioli, G. 2010)
رامان سپکټروسکوپي	د نمونې پېژندنه	د موادو چټک او غیرتخریبي تشخیص	(Ellis & Goodacre. 2006)
انفرارید فوري تبدیل سپکټروسکوپي	ماشین زده کړه	د سپېکټرونو اتومات تحلیل او طبقه‌بندي	(Pasquini, C. 2018)
ګاز کروماتوګرافي –کتلوي سپکټرومتري	ژوره زده کړه	د مرکباتو پېژندنه او وړاندوینه	(Cuperlovic-Culf, 2018)
لوړ فعالیت مایع کروماتوګرافي	وړاندوینې ماډلونه	د کروماتوګرافیک شرایطو اصلاح او اتومات تحلیل	(Boswell et al. 2015)

د لابراتوارونو اتومات کول د مصنوعي ځیرکتیا مهم تطبیق دی، چې د نمونو چمتو کول، د تجربو تنظیم، معلوماتو راټولول او د پایلو تفسیر په هوښیار سیستمونو سره اتومات کوي. AI-روبوټیک سیستمونه د تجربو شرایط د پخوانیو پایلو پر بنسټ اصلاحوي، چې انساني تېروتنې کموي، تکرارپذیري او څېړنیز موثریت زیاتوي او د کروماتوګرافیک او سپیکټروسکوپیک څېړنو کیفیت او سرعت لوړوي(Kalpana & Prasad, 2024) .. په درملو او بایوکیمیاوي څېړنو کې مصنوعي ځیرکتیا د نوو درملو د کشف، کیفیت کنټرول او بیومارکرونو پېژندنې لپاره د لویو مالیکولي، پروټیومیکس او میتابولومیکس معلوماتو په چټک تحلیل کې مهم رول لري. د ماشین زده‌کړې له لارې د درملو اغېزې، زهري ځانګړتیاوې او مالیکولي اهداف وړاندوینه کېږي او د تولید پروسې د مطلوب کولو او کیفیت تضمین کې هم کارول کېږي(Srivastava et al., 2025) . له پورته بحث څرګندیږي چې مصنوعي ځیرکتیا په تحلیلي کیمیا کې دقت، سرعت او نوښت لوړ کړی، او د انسان AI–ګډ تعامل به د دې علم د راتلونکي مهم بنسټ وي.

اخلاقي اغېزې

د مصنوعي ځیرکتیا (AI) ادغام په تحلیلي کیمیا کې د معلوماتو تحلیل، نمونو پېژندنې او پرېکړه‌نیونې وړتیاوې لوړې کړې، خو د انساني مداخلې د کمېدو له امله د مسؤلیت، شفافیت او اعتبار مهمې اخلاقي پوښتنې رامنځته شوې دي(European Commission, 2019). د ژورې زده‌کړې د «تور بکس» ماډلونو د پرېکړو د نه‌تشریح کېدو له امله، تشریح کېدونکې AIد پایلو د باور وړتیا او تکرارپذیرۍ لپاره اړینه ده(Arrieta et al., 2020). همدارنګه، په درمل‌پېژندنه، چاپېریالي څارنه او بیومېډیکل تحلیلونو کې د حساسو معلوماتو ساتنه او د هغوی اخلاقي مدیریت د محرمیت د خوندیتوب لپاره اساسي اهمیت لري (European Parliament & Council, 2016).

د AI ماډلونو د روزنیزو معلوماتو کیفیت او تنوع د پایلو پر اعتبار مستقیم اغېز لري؛ نامتوازنې ډېټا د نمونو د ناسمې طبقه‌بندۍ او علمي استنتاج د انحراف سبب کېدای شي (Mehrabi et al., 2021). همدارنګه، د AI له لارې د معلوماتو جعل او غیرواقعي علمي محتوا تولید د څېړنیزې امانت‌دارۍ لپاره جدي خطر دی (Nature Editorial, 2023). له همدې امله، وروستی

علمي او مسلکي پرېکړه باید د انسان څېړونکي په مسؤلیت کې پاتې شي او AI د انساني قضاوت د بدیل پر ځای د مرستندویې وسیلې په توګه وکارول شي (UNESCO, 2021). په تحلیلي کیمیا کې د AI اغېزمنه او مسؤلانه کارونه د تخنیکي پرمختګ ترڅنګ د اخلاقي اصولو، قانوني چوکاټونو او انساني څارنې متوازن مراعات ته اړتیا لري؛ نو د دې ټکنالوژۍ راتلونکی یوازې د ماډلونو په دقت، بلکې د شفافیت، باور وړتیا او اخلاقي مسؤلیت په تأمین پورې هم تړلی دی.

فرصتونه

په تحلیلي کیمیا کې AI د معلوماتو تحلیل، نمونو پېژندنې او علمي پرېکړو ملاتړ پیاوړی کړی او د ماشیني او ژورې زده‌کړې له لارې د پېچلو کیمیاوي معلوماتو د تفسیر او نوښت زمینه برابروي(Butler et al., 2018). د سپیکټروسکوپي، کروماتوګرافي او کتلوي سپیکټرومیټري د لویو معلوماتو چټک تحلیل د څېړنې سرعت، دقت او تکرارپذیري لوړوي او انساني تېروتنې کموي (Xu & Goodacre, 2018).

AI د تجربو د مطلوب ډیزاین، سرچینو د اغېزمن مدیریت او د کیمیاوي موادو او لګښتونو د کمولو له لارې د لابراتوارونو اقتصادي موثریت زیاتوي؛ همدارنګه د لوړ ابعاده معلوماتو په تحلیل کې د مرکبونو د پېژندنې دقت لوړوي(Mamoshina et al., 2016). سربېره پر دې AI د لویو معلوماتي زېرمو پټو اړیکو او الګوګانو په موندلو، د نویو موادو او درملو په کشف او د نړیوالې علمي همکارۍ په پیاوړتیا کې مهم فرصتونه رامنځته کوي (Butler et al., 2018; UNESCO, 2021). د دې فرصتونو دوامدار ارزښت بیا د معلوماتو کیفیت، د ماډلونو اعتبار، شفافیت او مسؤلانه اخلاقي کارونې پورې تړلی دی.

ننګونې

سره له دې چې AI په تحلیلي کیمیا کې د معلوماتو تحلیل او علمي کشفیاتو وړتیاوې لوړوي، د معلوماتو کیفیت، الګوریتمي اعتبار، متخصصینو کمښت او تخنیکي- عملي محدودیتونه یې مهمې ننګونې دي(Butler et al., 2018). نامکملې یا متعصبې روزنیزې ډېټا د ناسمې پایلې سبب کېږي او د تحلیلي کیمیا او ډېټا ساینس بین‌رشتوي مهارتونو کمښت د AIاغېزمن تطبیق محدودوي(Butler et al., 2018; OECD, 2019).

د معلوماتو مالکیت، محرمیت، حساب‌ورکونې او قانوني مسؤلیت په اړه ناهماهنګ نړیوال معیارونه، په ځانګړي ډول د حساسو معلوماتو د کارونې په برخه کې، جدي اخلاقي او حقوقي ننګونې دي(UNESCO, 2021). سربېره پر دې، د ژورې زده‌کړې «تور بکس» ماډلونه د پایلو د علمي تفسیر او باور وړتیا ستونزمنوي، چې له امله يې تشریح کېدونکې AI مهمه ده(Arrieta et al., 2020). همدارنګه د معلوماتو غلا، غیرمجاز لاسرسی او د الګوریتمونو تخریب د سایبري امنیت ګواښونه دي؛ نو د معلوماتي امنیت پیاوړي تدابیر د AI د مسؤلانه کارونې لپاره اړین دي(European Union Agency for Cybersecurity, 2023).

له پورته بحث څخه څرګندېږي چې په تحلیلي کیمیا کې د مصنوعي ځیرکتیا پراختیا، سره له دې چې د علمي نوښت او معلوماتي تحلیل لپاره مهم امکانات برابروي، له تخنیکي، علمي، اخلاقي او حقوقي ننګونو سره هم مخ ده. د معلوماتو کیفیت، د ماډلونو عمومي کولو وړتیا، د پرېکړو د شفافیت نشتوالی، د بین‌رشتوي متخصصینو کمبود او سایبري امنیت هغه مهم عوامل دي چې د AI پر بنسټ سیستمونو اعتبار محدودوي. له همدې امله، د باور وړ او پایدار ادغام لپاره د معیاري معلوماتي زېربناوو، روښانه اخلاقي او حقوقي چوکاټونو، تشریح کېدونکې مصنوعي ځیرکتیا او مسلکي بشري ظرفیتونو پیاوړتیا اړینه ده، څو د تخنیکي نوښت او اخلاقي مسؤلیت ترمنځ مناسب توازن رامنځته شي.

حل لارې او تنظیمي چوکاټونه

په تحلیلي کیمیا کې د AI د پراخ استعمال له امله د اخلاقي، تخنیکي او حقوقي ننګونو د کمولو لپاره د اغېزمنو تنظیمي چوکاټونو او علمي تګلارو اړتیا زیاته شوې ده. نړیوال بنسټونه د نوښت، اعتبار، شفافیت او ټولنیز مسؤلیت د توازن لپاره د مسؤلانه AI معیارونه رامنځته کوي، څو د دې ټکنالوژۍ ګټې اعظمي او احتمالي زیانونه محدود شي (UNESCO, 2021).

د AI د اخلاقي کارونې نړیوال معیارونه د تنظیمي تګلارو بنسټ جوړوي، چې د UNESCO او OECD اصول پر شفافیت، عدالت، حساب‌ورکونې او بشري څارنې ټینګار کوي. په تحلیلي کیمیا کې د دغو معیارونو پلي کول د بشري حقونو، علمي صداقت او ټولنیزې هوساینې د خوندیتوب ترڅنګ د څېړنیزو پایلو اعتبار او عامه باور پیاوړی کوي (OECD, 2019; UNESCO, 2021). په علمي لابراتوارونو کې د AI د مسؤلانه کارونې لپاره واضح پالیسۍ

اړینې دي، چې د معلوماتو راټولول، ذخیره، تحلیل او شریکول، د معلوماتو کیفیت، د الګوریتمونو اعتبار او بشري څارنه تنظیم کړي (۳-جدول). همدارنګه، مستند AI پروتوکولونه د څېړنو د تکرارپذیرۍ او باور وړتیا په لوړولو کې مهم رول لري (European Commission, 2019).

۳-جدول: د نړیوالو اخلاقي چوکاټونو مقایسه

چوکاټ	د تأسیس کال	مهم اصول	مأخذ
OECD AI Principles	2019	شفافیت، پیاوړتیا، حساب ورکول	(OECD, 2019)
UNESCO Recommendation on the Ethics of AI	2021	بشري حقونه، انساني وقار، ټول شمولیت	(UNESCO, 2021)
EU AI Act	2024	د خطر پر بنسټ مقررات، شفافیت، بشري څارنه	(European Union, 2024)

د شفافیت د زیاتولو لپاره د تشریح کېدونکې مصنوعي ځیرکتیا کارول د یوې مهمې حل لارې په توګه مطرح شوې دي. د XAI میتودونه څېړونکو ته اجازه ورکوي چې د AI د پرېکړو منطق درک او ارزونه وکړي. په تحلیلي کیمیا کې د دغو تخنیکونو کارول د پایلو د علمي توجیه، د خطا د تشخیص او د ماډلونو د باور وړتیا په پیاوړتیا کې مرسته کوي (Arrieta et al., 2020). د متخصصینو روزنه او ظرفیت لوړونه د AI د بریالي تطبیق لپاره بنسټیز اهمیت لري. راتلونکی نسل کیمیاپوهان باید د تحلیلي کیمیا ترڅنګ د ډېټا ساینس، ماشیني زده‌کړې او اخلاقي چوکاټونو په برخه کې هم کافي مهارتونه ترلاسه کړي. بین‌رشتوي روزنیز پروګرامونه کولی شي د AI د مؤثرې او مسؤلانه استفادې لپاره اړین بشري ظرفیت برابر کړي (Royal Society, 2019).

همدارنګه، د قانوني نظارت اغېزمن سیستمونه د AI د خوندي او مسؤلانه کارونې لپاره ضروري دي. د اروپايي اتحادیې د AI Act په څېر نوښتونه هڅه کوي چې د خطر پر بنسټ د ارزونې میکانیزمونه رامنځته کړي او د لوړ خطر لرونکو AI سیستمونو لپاره ځانګړي قانوني شرایط وضع کړي. دا ډول چوکاټونه د حساب‌ورکونې، معلوماتي امنیت او عامه خوندیتوب د تضمین لپاره مهم ارزښت لري (European Parliament, 2024). د نړیوالو معیارونو پلي کول،

د تشریح کېدونکې مصنوعي ځیرکتیا (XAI) پراختیا، د معلوماتو د کیفیت تضمین او د متخصصو بشري ظرفیتونو پیاوړتیا کولی شي د AI د کارونې اعتبار، شفافیت او حساب‌ورکونه لا پیاوړې کړي. له همدې امله، د تحلیلي کیمیا په راتلونکي کې د AI بریالی ادغام به تر ډېره د داسې متوازنو چوکاټونو پر رامنځته کولو پورې تړلی وي چې د علمي نوښت، اخلاقي مسؤلیت او ټولنیز باور ترمنځ پایدار توازن وساتي.

بحث او راتلونکي لیدلوري

د دې مروري مقالې موندنې ښيي چې AI په تحلیلي کیمیا کې د معلوماتو تحلیل، نمونو پېژندنې، تجربوي اصلاح او علمي کشفیاتو د چټکتیا مهم محرک ګرځېدلی دی. د AI او تحلیلي کیمیا ادغام د سپیکټروسکوپي، کروماتوګرافي، کتلوي سپیکټرومیټري او څومتغیره معلوماتو په تحلیل کې د پټو اړیکو موندلو او د دقیقې وړاندوینې او طبقه‌بندۍ زمینه برابروي(Butler et al., 2018). د دې مقالې موندنې د نړیوالو څېړنو له پایلو سره همغږې لري؛ AIد معلوماتو د تحلیل ترڅنګ د علمي فرضیو او نوو څېړنیزو لوریو په رامنځته کولو کې هم مهم رول لري .(Bajorath, 2022) خو د AI بریالیتوب د معلوماتو کیفیت، د ماډلونو اعتبار او شفافیت پورې تړلی دی، ځکه متعصبې، نیمګړې یا غیرمعیاري ډېټا د ناسمو پایلو سبب کېدای شي(Arrieta et al., 2020; Mehrabi et al., 2021).

د اخلاقي اړخونو له مخې، د دې مقالې موندنې د UNESCO (2021) او European Commission (2019)له اصولو سره سمون لري، چې شفافیت، حساب‌ورکونې، عدالت او بشري څارنه اړین بولي. په تحلیلي کیمیا کې د AI پراخ استعمال د معلوماتو محرمیت، علمي صداقت، د پرېکړو د تشریح وړتیا او د مسؤلیت وېش لا مهم کړي دي. د خودمختاره لابراتوارونو په برخه کې، AIد تجربو د ډیزاین، اجرا، تحلیل او اصلاح وړتیاوې زیاتوي، خو وروستي علمي قضاوت او اخلاقي مسؤلیت باید د انسان پر غاړه وي (MacLeod et al., 2020). له همدې امله، AIباید د انسان د ځایناستي پر ځای د هغه د علمي او فکري ظرفیت د پیاوړتیا وسیله وي.

په ټوله کې، د تحلیلي کیمیا راتلونکی د علمي نوښت، تخنیکي اعتبار او اخلاقي مسؤلیت پر توازن ولاړ دی. د لوړ کیفیت معلوماتو، شفافو الګوریتمونو او اغېزمنو تنظیمي چوکاټونو

له یوځای کېدو سره AI کولی شي د دقیقو تحلیلونو او علمي نوښتونو نوې مرحله رامنځته کړي(Topol, 2019; UNESCO, 2021). په راتلونکو کلونو کې به د لویو معلوماتو، پرمختللو سنسرونو، ماشیني زده‌کړې او محاسبوي ځواک د پراختیا له امله د AI رول په تحلیلي کیمیا کې لا پراخ شي او د علمي کشف، تجربوي ډیزاین او پرېکړه‌نیونې مهم پړاوونه به تر اغېز لاندې راولي(Butler et al., 2018). خودمختاره لابراتوارونه به هم د روبوټیک سیستمونو، AI او اتومات وسایلو په مرسته د تجربو د خپلواکې طرحې، اجرا او اصلاح زمینه پراخه کړي(MacLeod et al., 2020). همدارنګه، د کوانټمي محاسبې او AI ادغام د راتلونکي مهم علمي لوري په توګه مطرح دی، چې د پېچلو مالیکولي سیستمونو او لوړابعاده معلوماتو د تحلیل نوې وړتیاوې رامنځته کولای شي .(Biamonte et al., 2017) ورسره، د AI د اخلاقي کارونې نړیوال چوکاټونه د شفافیت، عدالت، حساب‌ورکونې او معلوماتي امنیت د تأمین لپاره د پراختیا په حال کې دي(UNESCO, 2021; European Parliament, 2024). په پای کې د تحلیلي کیمیا راتلونکی به د انسانAI پر همکارۍ ولاړ وي؛ AI به د معلوماتو تحلیل، نمونو پېژندنې او وړاندوینې ملاتړ کوي، خو علمي قضاوت، اخلاقي ارزونه او نوښتګر تفکر به د انسان اساسي مسؤلیت پاتې وي.

پایله

د دې مروري څېړنې موندنې څرګندوي چې مصنوعي ځیرکتیا (AI) په تحلیلي کیمیا کې د معلوماتو د تحلیل، نمونو د پېژندنې، وړاندوینې او اتومات پرېکړو ملاتړ له لارې د علمي پرمختګ یو مهم محرک ګرځېدلی دی. څېړنې وښودله چې د AI تر ټولو مهمې اخلاقي اغېزې د معلوماتو د محرمیت، الګوریتمي تعصب، د پرېکړو د شفافیت نشتوالی، د علمي مسؤلیت د وېش او د فکري ملکیت د حقونو له موضوعاتو سره تړاو لري. په ځانګړې توګه، د AI پر بنسټ تحلیلي سیستمونه که څه هم د معلوماتو د پروسس سرعت او د پایلو دقت لوړوي، خو د معلوماتو د کیفیت، محرمیت او عدالت په برخه کې نوې اخلاقي او حقوقي ننګونې هم رامنځته کوي. همدارنګه، دا څرګنده شوه چې د روزنیزو معلوماتو تعصب او د تور بکس ماډلونو کارونه کولای شي د علمي پایلو پر اعتبار او باور منفي اغېز وکړي. د دې څېړنې بله مهمه موندنه دا ده چې تشریح کېدونکې مصنوعي ځیرکتیا د علمي

باور، شفافیت او حساب‌ورکونې د پیاوړتیا لپاره یو اساسي میکانیزم ګڼل کېږي. د AI د پرېکړو د منطق روښانه کول نه یوازې د څېړنیزو پایلو د تفسیر او تکرارپذیرۍ کچه لوړوي، بلکې د مسؤلیت د ټاکلو او د اخلاقي ارزونې لپاره هم زمینه برابروي. سربېره پر دې، څېړنې وښودله چې د مصنوعي ځیرکتیا د مسؤلانه کارونې لپاره نړیوال اخلاقي اصول او تنظیمي چوکاټونه، لکه د شفافیت، عدالت، حساب‌ورکونې، بشري څارنې او معلوماتي امنیت معیارونه، د AI د خوندي او باوري تطبیق لپاره بنسټیز اهمیت لري. له همدې امله، د AI د پراخېدونکي کارونې ترڅنګ د اخلاقي او قانوني چوکاټونو پراختیا هم یوه نه بېلېدونکې اړتیا ده. په ټوله کې، د تحلیلي کیمیا راتلونکی به د انسان او مصنوعي ځیرکتیا د متقابلې همکارۍ پر بنسټ ولاړ وي، نه د انسان د ځایناستي پر بنسټ. که څه هم خودمختاره لابراتوارونه، هوښیار تحلیلي پلیټفارمونه او د معلوماتو پر بنسټ علمي کشفونه به د څېړنو موثریت او نوښت لا زیات کړي، خو د اخلاقي څارنې، علمي قضاوت او وروستۍ پرېکړې مسؤلیت باید د انسانانو په واک کې پاتې شي. له همدې امله سپارښتنه کېږي چې د شفافو او تشریح کېدونکو AI ماډلونو پراختیا ته لومړیتوب ورکړل شي، د متخصصینو بین‌رشتوي روزنه پیاوړې شي، د معلوماتو د محرمیت او امنیت لپاره اغېزمن میکانیزمونه رامنځته شي او د AI د اخلاقي اغېزو په اړه لا ژورې څېړنې ترسره شي. دا به د دې لامل شي چې مصنوعي ځیرکتیا د تحلیلي کیمیا په راتلونکو پرمختګونو کې د نوښت، اعتبار او اخلاقي مسؤلیت ترمنځ متوازن او پایدار رول ولوبوي.

ماخذونه

Adadi, A., & Berrada, M. (2018). Peeking inside the black-box: a survey on explainable artificial intelligence (XAI). *IEEE access*, *6*, 52138-52160. 10.1109/ACCESS.2018.2870052

Alberts, M., Laino, T., & Vaucher, A. C. (2024). Leveraging infrared spectroscopy for automated structure elucidation. *Communications Chemistry*, *7*(1), 268. https://doi.org/10.1038/s42004-024-01341-w

Arrieta, A. B., Díaz-Rodríguez, N., Del Ser, J., Bennetot, A., Tabik, S., Barbado, A., ... & Herrera, F. (2020). Explainable artificial intelligence (XAI): Concepts, taxonomies, opportunities and challenges toward responsible AI. *Information Fusion, 58*, 82–115. https://doi.org/10.1016/j.inffus.2019.12.012

Artioli, G. (2010). *Scientific Methods and Cultural Heritage: An Introduction to the Application of Materials Science to Archaeometry and Conservation Science*. Oxford University Press.

Ayres, L. B., Gomez, F. J. V., Linton, J. R., Silva, M. F., & Garcia, C. D. (2021). *Taking the leap between analytical chemistry and artificial intelligence: A tutorial review*. Analytica Chimica Acta, 1161, 338403. https://doi.org/10.1016/j.aca.2021.338403

Biamonte, J., Wittek, P., Pancotti, N., Rebentrost, P., Wiebe, N., & Lloyd, S. (2017). Quantum machine learning. *Nature, 549*(7671), 195–202. https://doi.org/10.1038/nature23474

Boswell, P. G., Schellenberg, J. R., Carr, P. W., Cohen, J. D., & Hegeman, A. D. (2015). Easy and accurate high-performance liquid chromatography retention prediction with different gradients, flow rates, and instruments by back-calculation of gradient and flow rate profiles. *Journal of Chromatography A, 1412*, 52–61. 10.1016/j.chroma.2011.07.070

Butler, K. T., Davies, D. W., Cartwright, H., Isayev, O., & Walsh, A. (2018). Machine learning for molecular and materials science. *Nature, 559*(7715), 547–555. https://doi.org/10.1038/s41586-018-0337-2

Contreras, J., & Bocklitz, T. (2025). *Explainable artificial intelligence for spectroscopy data: A review*. Pflügers Archiv-European Journal of Physiology, 477(4), 603–615. https://doi.org/10.1007/s00424-024-02997-y

Cuperlovic-Culf, M. (2018). *Machine Learning Methods for Analysis of Metabolic Data and Metabolic Pathway Modeling*. Metabolites, 8(1), 4. https://doi.org/10.3390/metabo8010004

Ellis, D. I., & Goodacre, R. (2006). Metabolic fingerprinting in disease diagnosis: Biomedical applications of infrared and Raman spectroscopy. *The Analyst, 131*(8), 875–885. https://doi.org/10.1039/b602376m

European Commission. (2019). *Ethics guidelines for trustworthy AI*. Brussels: High-Level Expert Group on Artificial Intelligence. https://digital-strategy.ec.europa.eu/en/library/ethics-guidelines-trustworthy-ai

European Parliament & Council. (2016). *Regulation (EU) 2016/679 (General Data Protection Regulation)*. Official Journal of the European Union. https://eur-lex.europa.eu/eli/reg/2016/679/oj/eng

European Parliament. (2024). *Regulation laying down harmonised rules on artificial intelligence (Artificial Intelligence Act)*. Official Journal of the European Union. https://eur-lex.europa.eu/eli/reg/2024/1689/oj/eng

European Union Agency for Cybersecurity (ENISA). (2023). *ENISA threat landscape 2023*. Luxembourg: Publications Office of the European Union. https://www.enisa.europa.eu/publications/enisa-threat-landscape-2023

Flanagan, A. R., Dalal, D., & Glavin, F. G. (2025). *Exploring generative artificial intelligence and data augmentation techniques for spectroscopy analysis*. Chemical Reviews, 125(13), 6130–6155. https://doi.org/10.1021/acs.chemrev.4c00815

Fuente-Ballesteros, A., Samanidou, V., Daryanavard, S. M., Ares, A. M., & Bernal, J. (2025). Artificial intelligence as a scientific copilot in analytical chemistry: Transforming how we write, review, and publish. *Analytical Chemistry*, *97*(38), 20667-20672. DOI: 10.1021/acs.analchem.5c03767

Harris, D. C. (2020). *Quantitative chemical analysis* (10th ed.). W. H. Freeman and Company.

Hashemi,S Hossein and Kaykhaii,M . (2026). The rise of artificial intelligence in analytical chemistry: advancements in spectroscopy and chromatography. *Journal of Chemical, Biological and Medicinial Sciences*, *13*(4), 990-1012.
https://doi.org/10.1016/j.aca.2021.338403

Hussain, C. M., Hussain, G., & Keçili, R. (2025). Smart analytical chemistry: Integrating green, sustainable, white and AI-driven approaches in modern analysis. *TrAC Trends in Analytical Chemistry*, *191*, 118295. https://doi.org/10.1016/j.trac.2025.118295

Kuhn, S., de Jesus, R. P., & Borges, R. M. (2024). Nuclear Magnetic Resonance and Artificial Intelligence. *Encyclopedia*, *4*(4), 1568-1580. https://doi.org/10.3390/encyclopedia4040102

Lu, X. Y., Wu, H. P., Ma, H., Li, H., Li, J., Liu, Y. T., ... & Liu, G. K. (2024). Deep learning-assisted spectrum–structure correlation: state-of-the-art and perspectives. *Analytical Chemistry*, *96*(20), 7959-7975. https://doi.org/10.1021/acs.analchem.4c01639

MacLeod, B. P., Parlane, F. G. L., Morrissey, T. D., Häse, F., Roch, L. M., Dettelbach, K. E., ... & Hein, J. E. (2020). Self-driving laboratory for

accelerated discovery of thin-film materials. *Science Advances, 6*(20), eaaz8867. https://doi.org/10.1126/sciadv.aaz8867

Mamoshina, P., Vieira, A., Putin, E., & Zhavoronkov, A. (2016). Applications of deep learning in biomedicine. *Molecular Pharmaceutics, 13*(5), 1445–1454. https://doi.org/10.1021/acs.molpharmaceut.5b00982

Mehrabi, N., Morstatter, F., Saxena, N., Lerman, K., & Galstyan, A. (2021). A survey on bias and fairness in machine learning. *ACM Computing Surveys, 54*(6), 1–35. https://doi.org/10.1145/3457607

Nature Editorial. (2023). Tools such as ChatGPT threaten transparent science; here are our ground rules for their use. *Nature, 613*(7945), 612. https://doi.org/10.1038/d41586-023-00191-1

Nowak, P. M. (2026). Artificial intelligence in analytical chemistry: Towards yet undiscovered opportunities. Analytical Chemistry, 98(8), 5843–5853. https://doi.org/10.1021/acs.analchem.5c06840

OECD. (2019). *OECD principles on artificial intelligence*. Paris: Organisation for Economic Co-operation and Development. https://www.oecd.org/en/topics/sub-issues/ai-principles.html

Pan, L., Zhang, P., Daengngam, C., & Chongcheawchamnan, M. (2021). *A review of artificial intelligence methods combined with Raman spectroscopy to identify the composition of substances*. Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems, 215, 104350. https://doi.org/10.1002/jrs.6225

Pasquini, C. (2018). Near infrared spectroscopy: A mature analytical technique with new perspectives. *Journal of the Brazilian Chemical Society, 29*(10), 1989–1996. 10.1016/j.aca.2018.04.004

Prasad, S. K., & Kalpana, D. I. V. E. K. A. R. (2024). Automation in analytical chemistry: the role of AI in chromatography. *Int. J. Appl. Pharm*, *16*, 14-21. https://doi.org/10.22159/ijap.2024v16i3.50290

Rial, R. C. (2024). AI in analytical chemistry: Advancements, challenges, and future directions. Talanta, 274, 125949. https://doi.org/10.1016/j.talanta.2024.125949

Royal Society. (2019). *Explainable AI: The basics*. London: The Royal Society. https://royalsociety.org/-/media/policy/projects/explainable-ai/ai-and-interpretability-policy-briefing.pdf

Schrader, M. L., Schäfer, F. R., Schäfers, F., & Glorius, F. (2024). Bridging the information gap in organic chemical reactions. *Nature Chemistry*, *16*(4), 491-498. https://doi.org/10.1038/s41557-024-01470-8

Skoog, D. A., Holler, F. J., & Crouch, S. R. (2018). *Principles of instrumental analysis* (7th ed.). Cengage Learning.

Srivastava, M., Nandan, S., Zaidi, A., et al. (2025). *Artificial Intelligence Driven Applications in Analytical Chemistry, Drug Discovery, and Food Science: Advancements, Outlook, and Challenges*. ChemistrySelect, 10(16), e202404446. https://doi.org/10.1002/slct.202404446

Topol, E. J. (2019). *Deep medicine: How artificial intelligence can make healthcare human again*. New York: Basic Books.

United Nations Educational, Scientific and Cultural Organization (UNESCO). (2021). Recommendation on the ethics of artificial intelligence. UNESCO. https://unesdoc.unesco.org/ark:/48223/pf0000381137

Wellawatte, G. P., & Schwaller, P. (2025). Human interpretable structure-property relationships in chemistry using explainable machine learning and large language models. *Communications Chemistry*, *8*(1), 11. https://doi.org/10.1038/s42004-024-01393-y

Xu, Y., & Goodacre, R. (2018). On splitting training and validation set: A comparative study of cross-validation, bootstrap and systematic sampling for estimating the generalization performance of supervised learning. *Journal of Analysis and Testing, 2*(3), 249–262. https://doi.org/10.1007/s41664-018-0068-2

Yabalak, E. (2025). The dual edge of AI: advancing and endangering scientific integrity in chemistry. *AI and Ethics*, *5*(5), 4635-4643. https://doi.org/10.1007/s43681-025-00829-y

Yadav, S., Chandra, H., Tiwari, K. S., Bharty, M. K., Chandravanshi, R., Chauhan, D. S., & Quraishi, M. A. (2025). A review on the role of artificial intelligence and data science in green and sustainable chemistry: current trends and futuristic pathways. *Discover Chemical Engineering*. https://doi.org/10.1007/s43938-025-00104-w