

OBSAH

Předmluva překladatelů	7
Předmluva	11
ČÁST I PROGRAMOVÁNÍ POČÍTAČŮ A JAZYK BASIC	13
1 Úvod do číslicových počítačů	14
Vnitřní struktura počítače	18
Součásti číslicového počítače	20
Základní procesní jednotka	21
Operační paměť	22
Vstup	25
Výstup	28
Charakteristika číslicového počítače z hlediska uživatele	29
2 Počítačová logika, programování a vývojové diagramy	33
Počítačová logika	33
Vývojové diagramy	38
Programovací jazyky	41
3 BASIC	45
Základní prvky jazyka BASIC	46
Příkazy jazyka BASIC	54
Další prvky jazyka BASIC	83
Alfanumerické informace	95
ČÁST II CHEMICKÉ PROGRAMY	100
1A Molární hmotnost uhlovodíků	102
1B Molární hmotnost binárních sloučenin	104
1C Molární hmotnost několika binárních sloučenin	106
1D Molární hmotnost několika víceprvkových sloučenin	108
2 Přepočet teploty	111
3A Ideální plyn	114
3B Obecný program pro ideální plyn	116
4A Ideální nebo van der Waalsův plyn	119
4B Ideální nebo van der Waalsův plyn - spojené řešení	123
5 Koncentrace roztoků	125
6 Střední kvadratická rychlost molekul	128
7 Rastova metoda stanovení molární hmotnosti	131

8	Technika práce s poli	134
9A	Sumární vzorce látek z elementární analýzy	139
9B	Přijatelné sumární vzorce látek z elementární analýzy	142
10	Spektra jednoelektronových atomů	145
11	Anorganická kvalitativní analýza	151
12	pH slabé kyseliny metodou postupných aproximací	156
13	Výpočet pH slabé kyseliny aproximací ze sady deseti hodnot	160
14	Kreslení grafů pomocí tiskárny	165
15	Simulace titrace slabé kyseliny silnou zásadou	180
16	Simulace výpočtu pH při titraci slabé zásady silnou kyselinou	187
17	Simulace potenciometrické titrace	195
18	Lokalizace koncového bodu titrační křivky	204
19	Organická syntéza	209
20	Výpočet molární hmotnosti a procentuálního zastoupení prvků	214
21A	Empirické vzorce z hmotnostní spektrometrie	219
21B	Výpočet molární hmotnosti z dat hmotnostní spektrometrie	223
22	Frakční destilace	227
23	Frakční destilace - fázový diagram	231
24	Teoretický tvar NMR - diagramu	236
25	Výpočet difrakce paprsků X	239
26	Rozptyl částic alfa	244
27	Poloměr atomového jádra a jeho vazebná energie	247
28	Rovnice cyklotronu	251
29	Výpočet čísla π metodou Monte Carlo	255
30	Určení kořene rovnice metodou půlení intervalu	259
31	Numerická integrace Simpsonovým pravidlem	262
32	Výpočet změny entropie z měrného tepla	265
33	Numerické řešení diferenciálních rovnic	269
34	Vyhodnocení statistických charakteristik	273
35	Lineární metoda nejmenších čtverců	279
36	Spektrofotometrie	284
37	Infračervená spektroskopie	288
38	Termodynamické parametry	294
39	Vyrovnaní exponenciálou	297
40	Chemická kinetika	302
41	Parabolická metoda nejmenších čtverců	307
42	Inverze matice	314
43	Kvantitativní analýza hmotnostní spektrometrií	325
44	Obecná metoda nejmenších čtverců	330

PŘÍLOHY

A	Binární aritmetika	342
	Vztahy mezi binárními a dekadickými čísly	342
	Binární sčítání	343
	Binární odčítání	343
	Binární násobení a dělení	344

	Implementace binární aritmetiky na počítači	345
B	Anglicko-český slovník počítačové terminologie	346
C	Optimalizace programů	353
D	Ladění programů	355
	Chyby odhalené při kompilaci	356
	Chyby při výpočtu	358
	Literatura	363
	Rejstřík	365