

# OBSAH

I.	VYBRANÉ KAPITOLY Z APLIKOVANÉ MATEMATIKY A STATISTIKY	5
1.	Statistické zpracování experimentálních výsledků	
1.1	Chyby měření a zpracování experimentálních výsledků	5
1.2	Střední hodnota a rozptyl opakovaného měření jedné veličiny	6
1.3	Interval spolehlivosti parametrů normálního rozdělení, hladina významnosti	7
1.4	Testování statistických hypotéz o parametrech normálního rozdělení	8
1.5	Analýza rozptylu	11
1.5.1	Jednofaktorový komplex	11
1.5.2	Dvoj- a třífaktorový komplex	14
1.6	Metoda nejmenších čtverců	14
1.6.1	Odhad rozptylu	15
1.6.2	Jednoduchá lineární regrese	15
1.6.3	Statistické testy na parametrech regrese	17
1.6.4	Pojem korelace, korelace mezi dvěma veličinami	18
1.6.5	Dvojnásobná a vícenásobná lineární regrese	19
1.6.6	Vícenásobná korelace, parciální korelační koeficienty	20
1.6.7	Programy REGUN a MULREG	21
1.7	Metoda hlavních komponent a faktorová analýza	21
1.7.1	Počet faktorů	22
1.7.2	Krátký cyklus	23
1.7.3	Rotace	24
1.7.4	Kombinace	24
1.7.5	Cílové testování	25
1.7.6	Program FACOM	26
2.	Základy optimalizace	27
2.1	Jednorozměrná optimalizace, Fibonacciho metoda	27
2.2	Vícerozměrná optimalizace	28
2.2.1	Metoda Monte Carlo	28
2.2.2	Simplexová metoda	29
2.2.3	Levenberg-Marquardtova metoda	30
2.3	Odhad směrodatných odchylek parametrů	32
2.4	Program TRIPTM	32
3.	Vybrané numerické metody	33
3.1	Numerická derivace	33
3.2	Numerická integrace	34
3.3	Interpolace	34
3.4	Vyhlazování závislostí	35
3.5	Program NUMER	37
II.	OPTIMALIZOVANÉ MĚŘENÍ A ZPRACOVÁNÍ VÝSLEDKŮ V ORGANICKÉ CHEMII	38
4.	Měření rychlostních konstant a zpracování experimentálních výsledků	38
4.1	Podmínky a zásady měření rychlostních konstant	38
4.2	Zpracování experimentálních výsledků	41
4.2.1	Určení řádu reakce	41
4.2.2	Reakce 1. řádu	42
4.2.3	Pseudomonomolekulární reakce	44

4.2.4	Reakce 2.řádu	44
4.2.5	Rovnovážné reakce	46
4.2.6	Bočné reakce	47
4.2.7	Konkurenční reakce	48
4.2.8	Následné reakce	49
4.2.9	Autokatalytické reakce	51
4.2.10	Složité reakce	52
5.	Měření rovnovážných konstant a zpracování experimentálních výsledků	53
5.1	Podmínky a zásady měření rovnovážných konstant a jejich vyhodnocování	53
5.2	Podmínky, zásady měření a vyhodnocování disociačních konstant potenciometrickou titrací, program CALCPK	54
5.3	Podmínky, zásady měření a vyhodnocování disociačních konstant spektrální metodou, konstrukce aciditní H-funkce, program ACID	56
6.	Měření, zpracování a interpretace extratermodynamických vztahů ETR (lineárních vztahů volných energií LFER)	59
6.1	Teoretické základy extratermodynamických vztahů	59
6.2	Měření, zpracování a interpretace aktivačních parametrů, isokinetická teplota	61
6.2.1	Měření aktivačních parametrů	61
6.2.2	Měření isokinetické teploty	61
6.3	Měření, zpracování a interpretace substitučních efektů, Hammettova a podobné rovnice, indukční, mesomerní a sterické efekty	63
6.3.1	Hammettova rovnice	63
6.3.2	Taftova rovnice	67
6.4	Měření, zpracování a interpretace rozpouštědlových efektů	69
6.4.1	Fyzikální modely rozpouštědlových efektů	69
6.4.2	Měření, zpracování a interpretace rozpouštědlových efektů	71
6.4.3	Vodně organická rozpouštědla	72
6.5	Měření, zpracování a interpretace vlivu kyselin a zásad na chemické reakce, aciditní funkce	74
6.5.1	Specifická katalýza	74
6.5.2	Obecná katalýza, Brønstedův vztah	75
6.5.3	Nukleofilní katalýza	76
6.5.4	Měření a zpracování výsledků acidobazické katalýzy	76
6.5.5	Některé významné příklady acidobazické katalýzy	77
6.5.6	Silně kyselé nebo silně bazické prostředí, aciditní funkce	78
6.6	Měření, zpracování a interpretace izotopových efektů	81
6.6.1	Primární kinetický izotopový efekt	81
6.6.2	Sekundární kinetický izotopový efekt	82
6.6.3	Rozpouštědlový izotopový efekt deuteria	82
6.6.4	Stopovací použití izotopů	84
6.7	Měření, zpracování a interpretace solných efektů	84
	Přílohy	86
	Literatura	113