

# OBSAH

Předmluva . . . . .	7
1 Předmět korelační analýzy . . . . .	9
1.1 Korelační analýza a její úkoly . . . . .	10
1.2 Rovnovážné konstanty . . . . .	10
1.3 Rychlostní konstanty . . . . .	15
1.4 Závislost reaktivity na teplotě . . . . .	19
1.5 Statistické faktory . . . . .	25
1.6 Ostatní fyzikální veličiny . . . . .	29
1.7 Biologické aktivity . . . . .	33
1.8 Experimentální chyby . . . . .	35
2 Kvalitativní teorie reaktivity . . . . .	42
2.1 Závislost vlastností na struktuře . . . . .	42
2.2 Teorie substitučních efektů . . . . .	45
2.3 Indukční efekt . . . . .	49
2.4 Mezomerní (konjugační) efekt . . . . .	52
2.5 Sterický efekt . . . . .	55
2.6 Vliv rozpouštědla . . . . .	58
3 Hammettova rovnice jako příklad korelačního vztahu . . . . .	70
3.1 Odvození Hammettovy rovnice . . . . .	70
3.2 Konstanty substituentů $\sigma$ . . . . .	74
3.3 Reakční konstanty $\rho$ . . . . .	79
3.4 Rozsah platnosti Hammettovy rovnice a odchylky od ní . . . . .	86
3.5 Aplikace Hammettovy rovnice . . . . .	91
4 Teoretické aspekty korelačních rovnic Hammettova typu . . . . .	96
4.1 Matematický tvar a formální teorie . . . . .	96
4.2 Termodynamické aspekty rovnic Hammettova typu . . . . .	103
4.3 Izokinetický vztah . . . . .	108
4.4 Kvantově chemické aspekty . . . . .	113
4.5 Elektrostatická teorie . . . . .	116
5 Rozšíření platnosti Hammettovy rovnice . . . . .	122
5.1 Duální a normální hodnoty konstant $\sigma$ . . . . .	122
5.2 Polysubstituce a aditivita . . . . .	130
5.3 Různé základní skelety . . . . .	131

6	Kvantitativní vyhodnocování efektů I, M a S . . . . .	137
6.1	Indukční efekt a Taftova rovnice . . . . .	137
6.2	Mezomerní (konjugační) efekt . . . . .	145
6.3	Sterické a ostatní efekty . . . . .	149
6.4	Víceparametrové korelační rovnice . . . . .	155
7	Ostatní korelační rovnice . . . . .	159
7.1	Speciální korelace substitučních efektů . . . . .	159
7.2	Korelace fyzikálních vlastností . . . . .	160
7.3	Korelace pro závislost na rozpouštědle . . . . .	166
7.4	Korelace pro závislost na činidle . . . . .	172
7.5	Brønstedova rovnice . . . . .	174
7.6	Korelace biologických aktivit . . . . .	178
8	Některé obecnější úlohy chemometrie . . . . .	184
8.1	Faktorová analýza . . . . .	184
8.2	Diskriminační analýza . . . . .	186
8.3	Rozpoznávání vzorů (pattern recognition) . . . . .	188
8.4	Aditivní vztahy . . . . .	190
9	Některé statistické problémy . . . . .	197
9.1	Základní statistické pojmy . . . . .	197
9.2	Lineární regrese . . . . .	201
	Literatura . . . . .	209
	Rejstřík . . . . .	214