

OBSAH

	str.
Úvod	3
I. EXPERIMENTY	5
1. Měření reaktivit competiční technikou	5
2. Kinetický izotopový efekt	8
3. Molekularita substitučních reakcí na nasyceném uhlíku	12
4. Určení vlivu rozpouštědla na rychlost reakce (solvent efekt)	16
5. Vliv pH na reakční rychlost	19
6. Brønstedtův kinetický solný efekt	21
7. Účast sousední skupiny na reakci	24
8. Vliv teploty na reakční rychlost	29
9. S_N2 reakce. Kinetika nukleofilní substituce	30
10. Extratermodynamické vztahy	31
11. Saturační efekt	35
12. Využití dipólmomentů při stanovení struktury	36
13. Charge-transfer komplexy	41
14. Boltzmannův distribuční zákon	45
15. Fotoizomerizace azobenzenu	46
16. Klasifikace polarit rozpuštědel	47
17. Měření substitučních efektů IČ spektroskopii	51
18. Přiřazení infračervených absorbančních pásů	52
19. Elektrofilní aromatická substituce	57
20. Keto - enol tautomerie	59
21. Studium indukčních a sterických efektů pomocí NMR	61
22. Geometrická izomerie a NMR	64
23. Vodíková vazba	66
II. ZÁKLADNÍ POJMY MATEMATICKÉ STATISTIKY	73
II.1 Teorie chyb	73
II.2 Jednorozměrná náhodná veličina	73
II.3 Zákony rozdělení náhodných veličin	74
II.4 Charakteristiky náhodné veličiny	75
II.4.1 Charakteristiky úrovně	75
II.4.2 Charakteristiky variability	77
II.5 Charakteristiky funkce náhodných veličin	78
III. ZÁKLADY BODOVÉHO ODHADU	79
III.1 Základní pojmy teorie bodového odhadu	79
III.2 Základní metody bodového odhadu	79
IV. INTERVALY SPOLEHLIVOSTI	80
V. TESTOVÁNÍ STATISTICKÝCH HYPOTÉZ	82
V.1 Parametrické testy	83
V.2 Neparametrické testy	85
V.2.1 Znaménkový test	85
V.2.2 Jednovýběrový Wilcoxonův test	86
V.2.3 Dvouvýběrový Wilcoxonův test	86
VI. ANALÝZA ROZPTYLU	87
VI.1 Jednofaktorový komplex	88
VI.2 Dvoj a vícefaktorový komplex	90
VI.3 Program ANVAR	90
VII. REGRESE A KORELACE	91
VII.1 Míry těsnosti závislostí	91
VII.2 Parametrické aproximace závislostí	93
VII.3 Lineární regresní závislosti	93

	str.	
VII.3.1	Jednoduchá lineární regrese	94
VII.3.2	Dvojnásobná lineární regrese	96
VII.3.4	Vícenásobná lineární regrese	97
VII.3.5	Nelineární regrese	98
VII.3.6	Analýza regresních závislostí	99
VII.4	Program REGUN	101
VII.5	Program MULREG	101
VIII.	VYBRANÉ OPTIMALIZAČNÍ METODY	101
VIII.1	Jednorozměrné optimalizační metody	102
VIII.2	Vícerozměrné optimalizační metody	103
VIII.2.1	Metoda Monte Carlo	103
VIII.2.2	Simplexová metoda	104
VIII.2.3	Levenbergova-Marquardtova metoda	105
VIII.2.4	Davidonova-Fletcherova-Powellova metoda	106
VIII.3	Program OPTIM (TOPTIM)	107
	TABULKOVÁ PŘÍLOHA	109
	ZADÁNÍ PROGRAMŮ	117