Laboratoř informatiky

Okruh „Anorganická chemie“

1. Periodický zákon a stavba atomů, atom, atomové a hmotnostní číslo. Mol. Atomové orbitaly. Klasifikace prvků. Kovy, nekovy, polokovy. Skupinové názvy, s-, p-, d- a f-prvky. Přechodné a nepřechodné prvky. Velikost atomů
2. Iontová a kovová vazba, elektronegativita, oxidační stav. Model iontové vazby, polarizační síla a polarizovatelnost. Vlastnosti iontových sloučenin. Ionty v roztocích, rozpustnost solí. Model kovové vazby. Vlastnosti kovů.
3. Kovalentní vazba, strukturní vzorce. Rezonanční struktury. Polární kovalentní vazba. Polarita molekul. VSEPR, hybridizace AO. Vlastnosti molekulových a kovalentních pevných látek.
4. Vodík, kyslík, vazebné možnosti. Příprava a výroba. Voda, vodíkové můstky. Kyseliny a zásady. Klasifikace oxidů. Peroxidy. Ozónová díra.
5. Halogeny, vzácné plyny, vazebné možnosti, van der Waalsovy interakce. Příprava a výroba chloru. Halogenovodíky, halogenidy. Oxidy, oxokyseliny chloru a jejich soli.
6. Síra, vazebné možnosti, struktura síry. Sulfan a sulfidy. Oxid siřičitý. Odsiřování. Kyselina sírová. Peroxo-, thio- a chloroderiváty kyseliny sírové.
7. Dusík, fosfor, vazebné možnosti. Příprava a výroba. Amoniak, fosfan, hydrazin, azoimid. Nitridy, azidy, fosfidy. Oxidy dusíku, kyselina dusitá a dusičná, nitrosloučeniny. Oxidy a oxokyseliny fosforu. Polyfosfáty.
8. Uhlík, křemík a bor, alotropické modifikace uhlíku. Křemík a polovodiče. Vazebné možnosti prvků. Karbidy. Oxidy uhlíku. Skleníkový efekt. Pseudohalogenidy. Oxid křemičitý, křemičitany a silikony. Kyselina boritá
9. Kovy, chemické vlastnosti kovů. Princip výroby důležitých kovů (Fe, Al ,Cu, Pb, Zn, Sn, Ni, Ti). Základní struktura koordinačních sloučenin.
10. Nepřechodné a přechodné kovy, vazebné možnosti s-, p- a d- kovů, skupinové trendy, diagonální vztahy, stabilita oxidačních stavů. Kovy, polokovy a nekovy. Důležité sloučeniny Ti, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Zn, Hg.

Okruh „Organická chemie“

1. Alkany a cykloalkany, struktura a reaktivita, konstituční, konfigurační, konformační isomerie.
2. Alkeny - struktura, elektrofilní a radikálové reakce na dvojné vazbě a v řetězci.
3. Alkyny - kyselost, alkylace aniontu. Reaktivita trojné vazby. Stereochemie organických sloučenin.
4. Halogenalkany - struktura, nukleofilní substituce, stereochemie, mechanismus.
5. e, dehydratace.

E2 a E1 eliminace, vztah k nukleofilní substituci, dehydrohalogenac

6. Organokovové sloučeniny (Mg , Li, Zn, Cu). Struktura a reaktivita.
7. Konjugované systémy: allylový kation, dieny, jejich stereochemie a reaktivita.
8. Areny - aromaticita, elektrofilní substituce, mechanismus, základní typy reakcí. xidy.
9. Alkoholy a fenoly - struktura, acidobazické vlastnosti, reakce s nukleofily, dehydratace, oxidace. Ethery a epoxidy
10. Karbonylové sloučeniny, struktura, nukleofilní adice na karbonylovou skupinu, aldolizace a reakce příbuzné.
11. Karboxylové kyselin a funkční deriváty: struktura, acidita, nukleofilní acylová substituce, Claisenova kondenzace a reakce příbuzné.

Okruh „XML programování”

1. XML syntax
2. Validace XML dokumentů – principy DTD, Relax NG a XML Schema
3. Jmenné prostory (namespace), jejich syntaxe, příklady použití, účel.
4. Xpath – základní principy, osy (axis).
5. XSLT – základní syntaxe a principy.
6. Jazyk Python – principy, práce s texty, souborovým systémem.
7. Jazyk Python – zpracování XML dat
8. Kaskádové styly (CSS), usability

9. XHTML, porovnání s HTML
10. SVG, porovnání s bitmapovými formáty, výhody, nevýhody.

„Chemická informatika“

1. Primární zdroje, články – publikační proces.
2. Katalogy knihoven, získávání plných textů primárních zdrojů.
3. Internetové vyhledávače, využití pro hledán vědeckých a technických informací.
4. Využití citování pro získávání relevantních informací – Web of Science.
5. Rejstříky a abstrakta, Chemical Abstracts.
6. Hlavní referenční díla. Beilstein, Gmelin.
7. Zápis struktury chemických sloučenin, identifikátory.
8. Strategie hledání. Encyklopedie, monografie, tabulky, primární zdroje.
9. D Důvěryhodnost zdroje. Impact faktor, citovanost.
10. Patenty, normy, RFC, W3C recommendations.