

<b>Magisterské státní závěrečné zkoušky</b>	
Studijní program:	<b><i>Chemie a chemické technologie</i></b>
Studijní obor:	<b><i>Aplikovaná informatika v chemii</i></b>
Čtyři povinné okruhy:	<b><i>Teoretická chemie</i></b> <b><i>Aplikovaná informatika</i></b> <b><i>Počítačové zpracování chemických struktur</i></b> <b><i>Softwarová architektura</i></b>
<b><i>Teoretická chemie</i></b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Rozdíly mezi kvantovým a klasickým (Newtonovým) světem. Heisenbergův princip neurčitosti. de Broglieho hmotné vlny.</li> <li>• Základní aparát kvantové mechaniky. Schroedingerova rovnice. Vlnová funkce. Operátory. Born-Oppenheimerova aproximace.</li> <li>• Jednoduché analyticky řešitelné modely v kvantové mechanice. Částice v jámě, harmonický oscilátor, tuhý rotor, atom vodíku a atomové orbitály.</li> <li>• Molekulové orbitály, spin. Slaterův determinant. Hartree-Fockova metoda. Fockián a Fockovy rovnice. HF energie.</li> <li>• Bázové funkce, STO a GTO. Minimální báze, double (triple) zeta báze, split valence báze, polarizační funkce, difúzní funkce. Kontrakce bází. Poplovy a Dunningovy báze. BSSE.</li> <li>• Korelační metody - konfigurační interakce, Moeller-Plesset perturbační teorie, metoda vázaných klastrů</li> <li>• Molekulová mechanika - povrch potenciální energie, základní ingredience silových polí (vazebné a nevazebné příspěvky, jejich funkční tvar a parametry)</li> <li>• Povrch potenciální energie - důležité body na něm, optimalizační metody nederivativní a derivativní</li> <li>• Implicitní a explicitní solvatace. Poisson-Boltzmann a Generalized Born. TIP modely vody.</li> <li>• Molekulová dynamika, 2. Newtonův zákon, termodynamický a mechanický stav, ensemble, integrace pohybových rovnic, constraint vs. restraint</li> </ul>
<b><i>Aplikovaná informatika</i></b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Hledání v textových polí databází. Proximitní operátory. Rozšiřující a regulární výrazy.</li> <li>• Strategie hledání sloučenin v chemických databázích. Aplikace postupu pro základní referenční díla: Beilstein, SciFinder (REGISTRY).</li> <li>• Identifikace sloučeniny - pro a proti: chemických identifikátorů, linearizovaných zápisů, názvosloví a spojovacích tabulek.</li> <li>• Chemical Abstracts - hlavní produkty - principy, pokrytí. Struktura, hlavní typy indexů. Způsoby hledání chemických sloučenin.</li> <li>• Volně přístupné zdroje. Internetové vyhledávače využitelné pro hledání odborných informací (Google, Google Scholar, Google Books). Hodnocení důvěryhodnosti a nezájatosti zdroje.</li> <li>• Citovanost jako kritérium hodnocení, využití pro hledání relevantních informací - Science Citation Index. Impact faktor.</li> <li>• Formáty vědeckých elektronických dokumentů, jejich výhody a nevýhody (PDF, HTML, JPEG, PNG, ...).</li> <li>• Publikování v prostředí WWW. Technická řešení (statické, dynamické stránky): přehled základních standardů (HTML, CSS, XML, ..) a technologií (PHP, frameworks, redakční systémy, ...).</li> <li>• Programovací jazyky - kompilované, interpretované. Procedurální, funkcionální, objektově orientované. Jaký zvolit pro zpracování dat (textová, binární) v přírodních vědách - výkon, přenositelnost, srozumitelnost kódu, ...?</li> </ul>

<p><b>Počítačové zpracování chemických struktur</b></p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Grafické formáty pro popis chemických vzorců pro účely tisku a webové prezentace.</li> <li>• Teorie grafů - základní pojmy (graf, vrchol, hrana, orientovaný graf, stupeň vrcholu, atd.).</li> <li>• Algoritmy v teorii grafů - značkování vrcholů, výpočet vzdálenosti vrcholů, nejkratší cesta, prohledávání do hloubky a do šířky, detekce souvislých komponent, apod.</li> <li>• Využití teorie grafů v chemii - vztah mezi entitami v teorii grafů a v chemii - graf-molekula, vrchol-atom, hrana-vazba; Jednoduché výpočty a prohledávání molekulového grafu - sumární hmotnost, skupiny, cykly, apod.</li> <li>• Linearizované formáty pro popis topologie molekul - SMILES, InChI, InChIKey</li> <li>• Souborové formáty pro popis chemických struktur - Molfile, CML, PDB</li> <li>• Možnosti popisu reakcí v jednotlivých formátech</li> <li>• Chemické databáze z pohledu programátora - substrukturální vyhledávání, vyhledávání podobných struktur, fingerprinty.</li> <li>• Zdroje informací o chemických strukturách - PubChem, PDB, apod.</li> <li>• Knihovny a programy pro konverzi a zpracování chemických formátů.</li> </ul>
<p><b>Softwarová architektura</b></p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Třída, objekt, instance. Konstruktor. self .</li> <li>• Speciální metody (__str__ apod.).</li> <li>• Atributy instancí a atributy tříd, privátní metody a atributy. Vlastnosti (properties).</li> <li>• Dědičnost. Konstruktor a dědičnost.</li> <li>• Introspekce - kdo je rodič? Dotazování na atributy a metody. Jak poznat atribut od metody?</li> <li>• Dvě základní metodologie vývoje software.</li> <li>• Strukturování zdrojového kódu, balíky (modules, packages). Zásady psaní zdrojového kódu (komentáře, code convention).</li> <li>• Třívrstvá architektura.</li> <li>• Porovnání typového systému jazyků Java a Python.</li> <li>• Co je UML, základní diagramy a příklady jejich použití.</li> </ul>