

OBSAH

1. Úvod	5
2 Metody molekulárního modelování	7
3 Programy pro molekulární modelování	9
3.1 PC Spartan Pro – úvod	9
3.1.1 PC Spartan Pro – ovládání programu	11
3.1.1.1 Grafické prostředí programu.....	11
3.1.1.2 Nastavení prostředí programu	12
3.1.1.3 Vytváření modelů molekul v programu.....	13
3.1.1.4 Volby a typy metod výpočtů	14
4 Vybrané možnosti využití molekulárních modelů ve výuce 17	
4.1 Znázornění struktury organických sloučenin	17
4.2 Znázornění vazeb v organických sloučeninách	19
4.3 Modelování substitučního efektu v organických sloučeninách	22
4.4 Znázornění volné rotace kolem jednoduché vazby v organických sloučeninách	28
4.5 Znázornění interakcí v konjugovaných systémech organických sloučenin	30
4.6 Modelování průběhu organických reakcí	31
5 Molekulární modely a reaktivita organických sloučenin	34
5.1 Počítačové modelování bimolekulární nukleofilní substituce S_N2	35
5.1.1 Obecná charakteristika nukleofilních substitucí	38
5.1.2 Diskuze výsledků počítačového molekulárního modelování	40
5.1.2.1 Modelování interakce methylchloridu s nukleofilními částicemi Br^- a I^-	41
5.1.2.2 Modelování interakce methylchloridu s ambidentním nukleofilem CN^-	42
5.2 Modelování bimolekulární nukleofilní substituce S_N2 – závěry	42
6 Literatura	44
Příloha 1	49
Příloha 2	54