

# 1 OBSAH

<b>2 Úvod .....</b>	<b>5</b>
<b>3 Znázornění struktury a reakcí organických sloučenin .....</b>	<b>7</b>
3.1 <i>Vzorce sloučenin .....</i>	7
3.1.1 Úvod .....	7
3.1.2 Vývoj symboliky organických sloučenin.....	8
3.2 <i>Klasifikace vzorců v organické chemii.....</i>	11
3.2.1 Stechiometrické (empirické) vzorce.....	11
3.2.2 Molekulové (sumární, souhrnné) vzorce.....	12
3.2.3 Funkční (racionální) vzorce .....	13
3.2.4 Strukturní vzorce.....	13
3.2.5 Konstituční vzorce .....	14
3.2.6 Konfigurační vzorce .....	17
3.2.6.1 Bočná projekce.....	17
3.2.6.2 Fischerova projekce .....	19
3.2.6.3 Haworthova projekce .....	19
3.2.7 Konformační vzorce .....	21
3.2.7.1 Perspektivní projekce .....	21
3.2.7.2 Bočná projekce.....	21
3.2.7.3 Newmanova projekce .....	22
3.3 <i>Jiné způsoby vyjadřování struktury organických sloučenin ...</i>	24
3.4 <i>Modely organických sloučenin .....</i>	26
3.4.1 Materiální modely .....	26
3.4.2 Počítačové modely.....	28
<b>4 Znázorňování struktury organických sloučenin pomocí počítače.....</b>	<b>29</b>
4.1 <i>Počítačové molekulární modelování v kurikulu chemie .....</i>	29
4.2 <i>Znázornění struktury a reakcí organických sloučenin pomocí počítače .....</i>	31
4.2.1 Počítačová grafika v chemii.....	31
4.2.1.1 Přehled aplikací .....	31
4.2.2 Software pro tvorbu grafických podkladů ve výuce chemie.....	32
4.2.2.1 Barevné modely a rozlišení .....	33
4.2.2.2 Vektorové editory .....	35
4.2.2.3 Bitmapové editory .....	36
4.2.2.4 3D editory a animační software.....	38
4.2.3 Software pro tvorbu grafiky v chemii.....	39
4.2.3.1 Kreslení výukových schémat, aparatur, vzorců a rovnic.....	39

4.2.4	Programy pro tvorbu osobních databází.....	42
4.2.5	Zhodnocení softwarových produktů.....	43
4.2.6	Aplikace počítačových programů ve výuce .....	44
4.2.6.1	Alternativy zobrazení modelů .....	46
4.2.6.2	Geometrie molekul .....	46
4.2.6.3	Modely využívající kvantově-mechanických a molekulárně-mechanických výpočtů.....	48
4.2.6.4	Anaglyfy .....	51
4.2.6.5	VRML.....	51
4.2.6.6	Závislosti a grafy.....	52
4.3	<i>Vybrané alternativy využití molekulárních modelů ve výuce.....</i>	<i>54</i>
4.4	<i>Molekulární modely na www stránkách .....</i>	<i>54</i>
<b>5</b>	<b>Závěr .....</b>	<b>59</b>
<b>6</b>	<b>Literatura .....</b>	<b>60</b>
<b>7</b>	<b>Přílohy.....</b>	<b>64</b>