

Technická univerzita v Liberci

Fakulta pedagogická

Katedra chemie

Studijní obor: chemie – občanská výchova

08 – FP – KCH - 004

VIZUALIZACE CHEMICKÉ STRUKTURY MINERÁLŮ

Autor: Eva Lipavská

Adresa: Žďárec u Skutče 32, 539 73 Skuteč

Vedoucí práce: Ing. Jan Grégr

Stran	Tabulek	Obrázků	Grafů	Pramenů	Příloh
70	0	50	0	17	27

V Liberci dne 13.5.2008

Prohlášení o původnosti práce:

Prohlašuji, že jsem diplomovou práci vypracovala samostatně a že jsem uvedla veškerou použitou literaturu.

V Liberci dne: 13. 5. 2008

Eva Lipavská

Prohlášení k využívání výsledků DP:

Byla jsem seznámena s tím, že na mou diplomovou práci se plně vztahuje zákon č. 121/2000 o právu autorském zejména § 60 (školní dílo).

Beru na vědomí, že Technická univerzita v Liberci (TUL) má právo na uzavření licenční smlouvy o užití mé diplomové práce a prohlašuji, že **souhlasím** s případným užitím mé diplomové práce (prodej, zapůjčení, kopírování, apod.).

Jsem si vědoma toho, že: užití své diplomové práce či poskytnout licenci k jejímu využití mohu jen se souhlasem TUL, která má právo ode mne požadovat přiměřený příspěvek na úhradu nákladů, vynaložených univerzitou na vytvoření díla (až do jejich skutečné výše). Diplomová práce je majetkem školy, s diplomovou prací nelze bez svolení školy disponovat.

Beru na vědomí, že po pěti letech si mohu bakalářskou práci vyžádat v Univerzitní knihovně Technické univerzity v Liberci, kde bude uložena.

Autor:

Eva Lipavská

Podpis:

Adresa:

Žďárec u Skutče 32
Skuteč, 539 73

Datum:

13.5.2008

Poděkování:

Na tomto místě bych ráda poděkovala všem, kteří mě při psaní této diplomové práce podporovali, především svému vedoucímu práce Ing. Janu Grégrovi za jeho optimismus a odbornou pomoc. Děkuji za podporu samozřejmě také své rodině a příteli.

Anotace:

Diplomová práce pojednává o problematice vizualizace chemických struktur. Přináší popis k práci s programem Diamond. Tento program modeluje struktury minerálů. Je vhodný pro výuku chemie na 2. stupni základní školy. Popis práce s programem je určen učitelům, kteří neumějí anglicky nebo nemají velké zkušenosti s počítačovými programy.

Výstupy z programu Diamond a jejich převedení do prostorových zobrazení obohatí výuku chemie a pomohou žákům pochopit vlastnosti látek na základě jejich struktury.

Annotation:

This diploma thesis deals with the chemical structures visualization problems. It features a description of usage and work with program for modeling minerals structures Diamond. Diamond is useful for chemistry education in second level primary school. Its manual, included as a part of this thesis, is intended for teachers with few experiences with computers software application, or for teacher without knowledge of English.

Diamond spatial visualization output is a great aid in enriching chemistry education and helping pupils to understand properties of substances due to them inner structure.

OBSAH

OBSAH	8
1. ÚVOD	10
2. TEORETICKÁ ČÁST	11
2.1 Uvedení do problematiky mineralogie	11
2.1.1 Vznik minerálů	11
2.1.2 Vztah mineralogie-krystalografie	13
2.1.3 Vznik krystalu	13
2.1.4 Souměrnost krystalů	14
2.1.5 Krystalové soustavy	15
2.1.6 Fyzikální vlastnosti nerostů	17
2.1.7 Chemické vlastnosti nerostů	20
2.2 Zobrazení a modely	23
2.2.1 ICT na základních a středních školách	23
2.2.2 Počítačová podpora výuky chemie	24
2.2.3 Modelování ve výuce chemie	24
2.2.4 Klasické modely zobrazení struktur minerálů	24
2.2.5 Zobrazení struktur minerálů na webu	26
3. PRAKTICKÁ ČÁST	27
3.1 Využití vizualizačních programů v mineralogii	27
3.1.1. Základní pojmy z počítačové terminologie	27
3.2 Chemický vizualizační software DIAMOND 3.1	29
3.2.1 Získání software	29
3.2.2 Instalace software	30
3.2.3. Práce s programem	32
3.2.3.1 Spuštění programu	33
3.2.3.2 Popis prostředí	35
3.2.3.3 Základní funkce softwaru	35
3.2.3.4 Pohybování s modelem	39
3.2.4 Změny modelu	41
3.2.4.1 Nastavení pracovní plochy	41
3.2.4.2 Nastavení znázornění	42
3.2.4.3 Nastavení směru zobrazení, úhlu natočení a orientačního systému	44
3.2.4.4 Změny nastavení zobrazení modelu	45
3.2.4.5 Nastavení grafiky atomu	48
3.2.4.6 Nastavení grafiky atomových vazeb	48
3.2.4.7 Nastavení zobrazení mnohostěnů	49
3.2.4.8 Nastavení zobrazení buňky	50
3.2.4.9 Skrytí některých prvků modelu	50
3.2.5 Automatické rozšíření modelu struktury	50
3.2.6 Vkládání textu, souřadného systému a legendy do zobrazení	52
3.2.6.1 Text	52
3.2.6.2 Souřadný systém	52
3.2.6.3 Legenda	53

3.2.7 Ukončení programu.....	53
3.3 Přehled a stručný popis dalších vizualizačních programů	54
3.3.1 ACD/ChemSketch.....	54
3.4 Export dat do jiných vizualizačních programů	58
3.4.1 Přenos dat z programu Diamond do programu ViewerLite	58
3.4.2 Přenos dat z programu Diamond do programu Mercury.....	59
3.5 Výstupy z chemických vizualizačních programů.....	60
3.5.1 Výstupy vyžadující didaktickou techniku:	60
3.5.2 Výstupy nevyžadující didaktickou techniku:	60
4. ZÁVĚR.....	61
5. SEZNAM POUŽITÉ LITERATURY	62
6. PŘÍLOHY	63

1. ÚVOD

V dnešní době je zobrazování struktury látek důležité jak pro žáky, tak pro vědecké pracovníky. Ze struktury látek je totiž možné odvodit jejich vlastnosti a též využít modelové struktury k rozvoji prostorového vnímání v předmětu chemie.

Využívání modelů a modelování ve školních podmínkách je plně v souladu s rozvojem moderních věd i technické praxe. Je to jeden z efektivních teoretických nástrojů přírodovědného poznávání, které společně s empirickými nástroji (pozorováním, měřením a experimentem) nemůže v přírodovědném vzdělání chybět. Modelování struktur látek vytváří nové příležitosti k prezentaci problematických pasáží ve výuce chemie. Je třeba si uvědomit, že chemie je předmět, jehož obsah učiva je ve velké míře abstraktní. Popisuje zákonitosti a jevy, které jsou pro žáka těžko představitelné. Využitím správných modelů žák vidí prostorové uspořádání sloučenin, které může konfrontovat se svými představami a také vaznost jednotlivých prvků v chemické struktuře. Právě nepochopení a problémy pocházejí z nedostatečných a nepřesných modelů molekulárního světa.

Vizualizační programy poskytují mnoho možností. Mezi nejvýznamnější z nich patří trojrozměrná zobrazení struktur, jehož výhody tkví především v libovolném otáčení a rotaci struktury, změně barev atomů a vazeb, vstupu do centra modelu, samovolné rotaci modelu a mnoho dalších funkcí, které se osvědčí pro větší názornost a představivost při výuce chemie.

Tato práce se bude zabývat modelováním chemické struktury minerálů. Je zaměřená především na program Diamond, který se jeví nejvhodnějším. Měla by posloužit jako návod, jak s programem pracovat a využít ho co nejefektivněji. Stále více žáků si dnes žádá zábavné vyučování a také motivace je v předmětu chemie více než důležitá, proto je dobré se zaměřit na nové a lepší vyučovací metody.

2. TEORETICKÁ ČÁST

2.1 Uvedení do problematiky mineralogie

Mineralogie – věda zabývající se studiem minerálů(nerostů).

Minerál – prvek nebo chemická sloučenina, která je za normálních podmínek krystalická a která vzniká jako produkt geologických procesů.

Za minerály považujeme i:

- rtuť (která je za normálních podmínek kapalná)
- některé amorfní látky (opál SiO_2 , limonit Fe_2O_3 – tyto látky nevytváří krystaly, ale jen výplně, či kulovité, hroznovité, krápníkovité tvary)
- látky pocházející z jiných kosmických těles (Měsíc, Mars, meteority)
- biogenní materiály (guano-trus mořských ptáků, který obsahuje velké množství fosforu).

2.1.1 Vznik minerálů

Minerály vznikají krystalizací z tavenin, z roztoků nebo z plynů v zemské kůře.

- 1) krystalizace z magmatu – magma je přírodní křemičitanová tavenina, při tuhnutí magmatu začínají minerály krystalovat (každý minerál má charakteristický bod tuhnutí/tání). Za nejvyšších teplot (čili nejdříve) krystalují minerály s vysokým bodem tání. S klesající teplotou mění magma své složení. Z tohoto důvodu vznikají z magmatu minerály s různým chemickým složením. Toto znázorňuje Bowenovo reakční schéma.
- 2) Hydrotermální procesy (srážení z horkých roztoků) - horká voda v hloubi horninového tělesa rozpouští nebo vyluhuje minerály obsažené v horninách. Voda se obohacuje o minerální látky a stoupá trhlinami v hornině k povrchu, chladne a uvolňuje plyny. Při chladnutí se tak srážejí nové minerály a ty krystalizují na stěnách puklin. Vyplněná puklina se nazývá žíla. Vzniká tak např.: zlato, stříbro, sfalerit, pyrit, kalcit, fluorit, galenit, žilná křemen

- 3) Sopečné exhalace - plyny z vulkanické činnosti se ochlazují a látky přecházejí z plynného skupenství do skupenství pevného (podléhají sublimaci, proto se jim také říká sublimáty). Složení sopečných plynů výrazně závisí na jejich teplotě. Hlavními složkami jsou vodní páry, HCl , NH_4Cl , H_3BO_3 , H_2S , SO_2 , CO_2 . Takto vznikají minerály (sublimáty) síra S , halit NaCl , salmiak NH_4Cl , hematit Fe_2O_3 , magnetit Fe_3O_4 , pyrit FeS_2 .
- 4) Chemická sedimentace - odpařováním mořské vody v uzavřených zátokách dochází ke zvyšování koncentrace rozpuštěných solí. Soli se postupně srážejí a ukládají. Tímto způsobem vzniká sádrovec ($\text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$) a sůl kamenná (halit). Rozpouštěním a opětovným vysrážením vápenců v krasových oblastech vzniká kalcit (CaCO_3)-výzdoba podzemních dutin.
- 5) Přeměna (metamorfóza) - probíhá za vysokých teplot a tlaků, který drtí horniny. Tím se uvolňuje cesta pro plyny a roztoky unikající z magmatu v hloubce. Dochází k přínosu a odnosu některých látek, což je příčinou změny chemického složení hornin nebo minerálů. Příkladem přeměny je jílový minerál, který ztrácí část vody a mění se v slídu a poté až na bezvodý živec.
- 6) Zvětrávání - probíhá za přítomnosti kyslíku, vody a CO_2 a tím se vytváří nový půdní povrch. Na rychlost zvětrávání minerálů má vliv složení minerálu, tlak, teplota a čas. Živce v tomto případě zvětrávají na jílové minerály. Křemen a jiné tvrdé minerály odolávají zvětrávání. Pokud je voda transportuje, hromadí se v tzv. náplavech. U těžkých minerálů se jim říká rýžoviska. Například rýžoviska magnetitu, rutilu, kasiteritu, granátu, zlata, diamantu.
- 7) Biomíneralizace - vznik minerálů působením činnosti organismů: jde o produkty organismů, které se stávají součástí jejich těl. Minerály mají podíl na složení schránek nebo vnitřních koster organismů. Např. savci mají v kostech a zubech kalcit a apatit. Měkkýši mají vápnité schránky. Vaječná skořápka je složena z kalcitu, který produkuje slepice. Koráli mají kostru složenou z aragonitu. Některé bakterie jsou užitečné při srážení síry a oxidických železných rud.

Horniny - mechanické směsi různých minerálů (např. žula je složena z živce, křemene, slídy, atd.), monominerální horniny jsou tvořeny jen jedním minerálem (např. mramor se skládá jen ze zrn kalcitu). Horniny tvoří zemskou kůru a zabývá se jimi obor zvaný **petrologie**.

2.1.2 Vztah mineralogie-krystalografie

Krystal vzniklý geologickými procesy je minerál. Většina minerálů jsou krystaly. Existují však krystaly vypěstované uměle, které v přírodě nalezeny nebyly.

Obory mineralogie:

- 1) všeobecná (mineralogická krystalografie)
- 2) speciální (systematická)-studuje jednotlivé minerální druhy
- 3) genetická-studuje vznik a výskyt minerálů v přírodě
- 4) užitá (technická) - poznatky jsou využívány v průmyslu, při vyhledávání, těžbě a úpravě nerostných surovin. Gemologie- obor zabývající se drahými kameny.

Obory krystalografie:

- 1) morfologická - studuje zákonitosti vnějšího tvaru krystalů.
- 2) strukturní - studuje vnitřní stavbu krystalů.
- 3) fyzikální - studuje vzájemný účinek mezi krystaly a různými druhy energie. Např. optické, mechanické, elektromagnetické vlastnosti krystalů.
- 4) chemická - studuje chemické složení krystalů, fyzikálně-chemické podmínky jejich vzniku, vztahy mezi složením a vnitřní stavbou krystalů.
- 5) užitá - využití fyzikálních vlastností krystalů pro technické účely, zabývá se pěstováním syntetických krystalů pro technické využití.

2.1.3 Vznik krystalu

Krystal (krystalový mnohostěn) je omezen rovinnými plochami. Má hranu (setkání dvou ploch) a roh (setkání tří a více ploch).

Vznik krystalu – prvním stadiem je vznik nuklea (krystalového zárodku), což je nepatrné seskupení částic (atomů, iontů, molekul) jejichž uspořádání odpovídá struktuře budoucího

krystalu. K nukleaci přispívá porušení rovnovážného stavu soustavy (např. snížení teploty magmatu atd.). Poté nukleace přechází ve vlastní proces růstu krystalu. Růst krystalu se děje ukládáním stavebních částic do vrstev na povrchu krystalu. Stavební částice se připojují na energeticky nejvýhodnější místa (s nejnižší možnou energií). Na povrch rostoucího krystalu neustále dopadá hustý déšť stavebních částic a ty se připojují na různá místa povrchu krystalu. Po zaplnění celé vrstvy dojde k založení nové, nejčastěji na rohu krystalu.

Rovnoměrně vyvinutý krystal – krystal rostoucí mimo dosah rušivých vlivů, plochy krystalu jsou stejně velké a mají stejný tvar.

Nerovnoměrně vyvinutý krystal – krystaly rostou v některém směru rychleji než v ostatních analogických směrech. Plochy tohoto krystalu nemají stejnou velikost ani tvar, některé mohou i zaniknout.

Úhly, které spolu svírají stejnohlé plochy v krystalu však nepodléhají nerovnoměrnému růstu krystalu. Z tohoto vyplývá **zákon stálosti úhlů hran (Stensenův zákon)**: na všech krystalech téhož minerálu jsou úhly mezi stejnohlými plochami stejné (za stejného tlaku a teploty).

2.1.4 Souměrnost krystalů – je to pravidelnost polohy a vzájemného uspořádání jednotlivých ploch.

Rozlišujeme 3 druhy prvků souměrnosti:

1. rovina souměrnosti – rozděluje krystal na dvě symetrické poloviny tak, že se jedna polovina kryje se zrcadlovým obrazem poloviny druhé.
2. osa souměrnosti – je to myšlená přímka vedená středem krystalu. Při otáčení kolem této osy o 360° se krystal opět dostává do polohy shodné s výchozí polohou. Podle toho, kolikrát se při plném otočení docílí shoda s výchozí polohou, rozeznáváme osy dvoj-, troj-, čtyř- a šestičetné souměrnosti.
3. střed souměrnosti – krystal má střed souměrnosti, když každé jeho ploše odpovídá shodná a rovnoběžná plocha protější, otočená kolem tohoto myšleného středu o 180° .

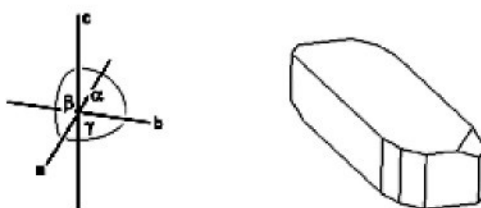
Společným znakem krystalových soustav je tzv. *krystalografický osní kříž*. Je to trojrozměrný souřadnicový systém, který umožňuje přesné určení polohy každé krystalové plochy.

2.1.5 Krystalové soustavy

Podle prvků souměrnosti můžeme krystalové tvary nerostů zařadit do skupin, tzv. krystalových soustav.

Podle vzrůstající souměrnosti jsou to soustavy: trojklonná (triklinická), jednoklonná (monoklinická), kosočtverečná (rombická), čtverečná (tetragonální), šesterečná (hexagonální), klencová a krychlová (kubická).

1) trojklonná soustava: nemá ani jednu rovinu souměrnosti, souměrná je jen podle středu souměrnosti. Každá plocha má svou odpovídající protiplochu. Osní kříž této soustavy tvoří tři osy svírající spolu kosé úhly.



Obr.2.1 zobrazení trojklonné soustavy – modrá skalice

Příklady minerálů trojklonné soustavy: chalkantit (modrá skalice), kaolinit, albit

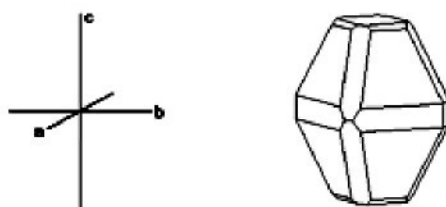
2) jednoklonná soustava: krystaly jsou souměrné podle jedné roviny souměrnosti, mívají též ve svém průřezu kosočtverec, všechny osy souměrnosti jsou nestejně dlouhé.



Obr.2.2 zobrazení jednoklonné soustavy – sádrovec

Příklady minerálů jednoklonné soustavy: mastek, ortoklas, sádrovec, amfibol, augit, biotit, epifor, muskovit, staurolit, wolframit.

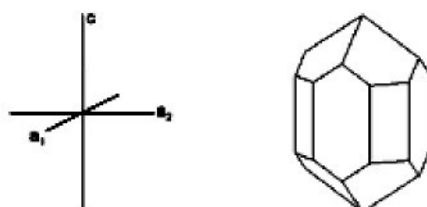
3) kosočtverečná soustava: minerály mají v průřezu tvar kosočtverce. Jsou souměrné podle tří na sebe kolmých rovin souměrnosti



Obr.2.3 zobrazení kosočtverečné soustavy – síra

Příklady minerálů: síra, baryt, olivín, antimonit, aragonit, topaz

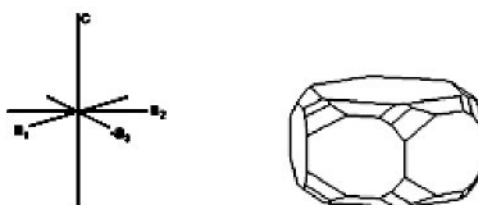
4) čtverečná soustava: krystaly mají pět rovin souměrnosti, pokud bychom otáčeli svisle orientovaným krystalem, dostaneme se do polohy shodné s výchozí polohou čtyřikrát - svislá osa je čtyřčetná. Krystaly mívají čtvercovitý průřez.



Obr.2.4 zobrazení čtverečné soustavy – rutil

Příklady minerálů: chalkopyrit, kasiterit, rutil

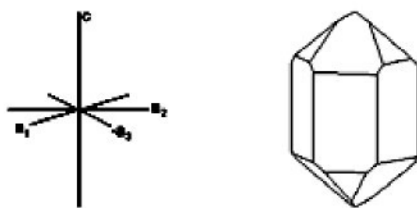
5) šesterečná soustava: krystal může mít sedm rovin souměrnosti, svislá osa je šestičetná, příčný průřez krystalu bývá šestiúhelníkový.



Obr.2.5 zobrazení šesterečné soustavy – apatit

Příklady minerálů: minerály: apatit, beryl, grafit

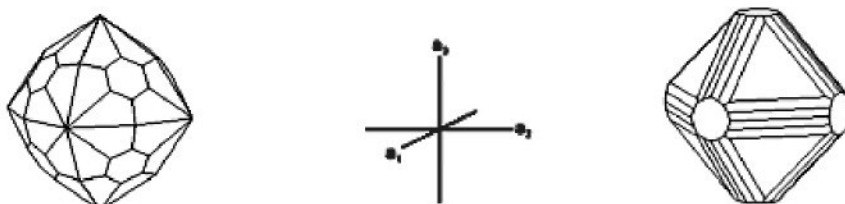
6) klencová soustava: někdy je pro zjednodušení řazena do šesterečné soustavy (u klencové soustavy je svislá osa trojčetná). Pro uhličitany a kalcit je typickým tvarem klenec.



Obr.2.6 zobrazení klencové soustavy – křemen

Příklady minerálů: hematit, kalcit, křemen, korund, magnezit, siderit, rumělka, turmalín

7) krychlová soustava: krystal má nejvíce rovin souměrnosti (9), v horninách můžou mít zrna krychlových minerálů kruhovitý průřez (granát). Krystaly mají tvar osmistěnu, dvanáctistěnu atd.



Obr.2.7 zobrazení krychlové soustavy – diamant

Příklady minerálů: diamant, galenit, fluorit, halit, granát, pyrit, sfalerit, měď, zlato stříbro.

2.1.6 Fyzikální vlastnosti nerostů

Určuje je vnitřní uspořádání atomů a způsob jejich vzájemných vazeb. Dva krystaly stejného chemického složení, ale různé struktury mohou mít zcela různé fyzikální vlastnosti (př. grafit-diamant).

Vlastnosti krystalů jsou obecně v různých směrech různé. Toto vystihuje pojem anizotropie, krystaly jsou anizotropní tělesa. Na rozdíl od amorfních látek, které jsou izotropní, jelikož jejich vnitřní struktura je chaotická, nepravidelná. Nepravidelnosti se ve větším objemu vzájemně ruší, proto všechny vlastnosti amorfních látek jsou nezávislé na směru.

Makroskopické vlastnosti krystalů: můžeme je pozorovat okem nebo je zjišťujeme pomocí jednoduchých přístrojů.

1) Hustota – je hmotnost jednoho centimetru krychlového látky vyjádřená v gramech. Je závislá na chemickém složení minerálu i na jeho struktuře, na teplotě a tlaku.

Metody měření hustoty minerálů:

Jsou založeny na srovnávání hmotnosti minerálů a stejného množství vody.

Můžeme použít i metodu měření hustoty v těžkých kapalinách (př. bromoform CHBr_3). U této metody musíme připravit kapalinu, která má stejnou hustotu jako má minerál. Ta je připravena ve chvíli, kdy se úlomky minerálu v kapalině vznášejí. Poté se změří hustota kapaliny a ta je rovna hustotě minerálu.

Další metodou je výpočet na základě rentgenometrických dat. Musíme znát objem základní buňky mřížky a počet a druh atomů v ní.

Minerály podle hustoty dělíme na lehké (hustota $1-2 \text{ g/cm}^3$), středně těžké ($2-4 \text{ g/cm}^3$), těžké ($4-6 \text{ g/cm}^3$).

Těžké minerály mají tendenci hromadit se v sedimentech (takto mohou vzniknout těžitelné akumulace - zlato, zirkon, magnetit), lehké minerály jsou odnášeny vodou.

2) Tvrdość – definována jako odpor proti vnikání cizího tělesa. Je závislá na struktuře krystalů, na pevnosti vazeb mezi stavebními částicemi. Také se někdy používá pojem vrypová tvrdost, což je schopnost krystalu odolávat proti poškození krystalové plochy jiným nerostem nebo předmětem.

Pro relativní srovnání tvrdosti nerostů vytvořil **Friedrich Mohs** (1773-1839) desetičlennou stupnici seřazenou tak, že každý tvrdší nerost rýpe do předcházejícího měkkého:

- | | |
|-------------|-------------|
| 1. mastek | 6. živec |
| 2. sádrovec | 7. křemen |
| 3. kalcit | 8. topaz |
| 4. fluorit | 9. korund |
| 5. apatit | 10. diamant |

K orientačnímu posouzení tvrdosti poslouží i rýpání nehtem (do 2. stupně), měděným drátkem (do 3. stupně), jehlou či nožem (do 5. stupně). Minerály rýpající do skla mají tvrdost větší než 5.

3) Štěpnost – rozpad minerálů na menší kousky podél rovin souvisejících s vnitřní strukturou krystalu. Děje se vlivem mechanického namáhání (úder kladívka, tlak nože). Minerály se

štípou podél krystalografických rovin, které mají nejmenší soudržnost. Štěpnost může být v několika různých směrech, např. sůl kamenná a galenit se štípe v krychlích nebo pouze v jednom směru jako třeba slída, sádrovec, topaz.

U podrobného prohlížení můžeme u průhledných krystalů zjistit tenké štěpné trhliny, ty nám pomohou při určování nerostu.

4) Lom – vzniká při mechanickém namáhání minerálu, který nemá štěpnost. Při nárazu se minerál nepravidelně láme. Vzhled lomné plochy nám určí typ lomu. Rozeznáváme lom rovný, nerovný, miskovitý, lasturnatý, hladký, tříštnatý.

Pružné minerály-slídy se při ohnutí a následném uvolnění tlaku vrátí zpět do původní polohy. Při překročení meze pružnosti se lupínek slídy zlomí.

Ohebné minerály-zlato, sádrovec, mastek se při ohnutí nevracejí do původní polohy.

Kujné a tažné minerály můžeme rozklepat v plíšek a vytáhnout v drátek. Souvisí to s existencí kovové vazby. Jde o zlato, stříbro, železo, argentit.

5) Barva – rozeznáváme podle ní dvě skupiny minerálů:

a) barevné minerály- barva je dána přítomností barevných iontů (chromoforů) ve strukturách minerálu. Je velmi stálá. Např. magnetit je vždy černý, azurit modrý, grafit černý, olivín zelený atd. Stejnou barvu jako minerál má i vryp.

b) zbarvené minerály (allochromatické) - barvu minerálu ovlivňují příměsi a pigmenty. Minerály zbarvené mívají několik barevných odrůd (př. křemen). Mají bílý, šedý nebo slabě zabarvený vryp. Příklady zbarvených minerálů: křemen, korund, apatit, kalcit, beryl atd. Jednotlivé barevné odrůdy se často označují různými názvy- červený korund je rubín, modrý korund je safír.

6) Lesk – je závislý na způsobu odrazu a lomu světla a na kvalitě povrchu minerálu. Čím více světla se při dopadu odrazí, tím větší má minerál odrazovou mohutnost.

Druhy lesku:

- *Kovový* (pyrit, galenit, antimonit)
- *Polokovový* (wolframit, kasiterit)
- *Nekovový* který se dále podle intenzity dělí na lesk
 - Diamantový (diamant, sfalerit)
 - Skelný (křemen, živec)
 - Perleťový (sádrovec, mastek, kalcit)

- Mastný (opál)
- Matný
- Hedvábný (sádrovec).

7) Propustnost světla (transparence) – minerály

- Průhledné – přes úlomek lze přečíst text (křišťál, sůl, topaz), pokud prochází všechny vlnové délky bez absorpce.
- Průsvitné – přes úlomek minerálu více či méně prochází světlo, nelze přečíst písmena, na hranách je průsvitný.
- Neprůhledné – minerál neprosvítá ani na hranách.
- Opakní - neprůhledné minerály, kovově lesklé.

2.1.7 Chemické vlastnosti nerostů

Zkoumá uspořádání atomů a iontů v krystalech a také síly, kterými jsou částice navzájem vázány a trvale udržovány v zákonitých polohách.

Velikost a tvar atomů a iontů

Atomy a ionty tvoří základní stavební jednotky všech krystalů. Krystal si lze představit vybudovaný z pravidelně uložených kulovitých nebo více či méně deformovaných atomů nebo iontů, které se vzájemně dotýkají. Poloměry těchto koulí označujeme jako atomové či iontové poloměry. V praxi se pro poloměry atomů nebo iontů používá jednotka ångström, $1\text{Å} = 10^{-10}\text{m}$.

Vazby v krystalech

Chemické vazby působí mezi stavebními částicemi každého krystalu. Nutí částice zaujímat rovnovážné polohy a setrvávat v nich.

Iontová vazba

Je založena na elektrostatickém přitahování opačně nabitých částic (iontů). Vlastnosti iontových krystalů: vysoký bod tání (velká pevnost iontové vazby), nízká elektrická vodivost (ve struktuře nejsou volné elektrony), tvrdost, štěpnost (při nárazu nebo stlačení dojde k posunu jednotlivých vrstviček atomů, a také k přiblížení stejně nabitých iontů, které se odpuzují).

Kovalentní vazba

Je založena na společném sdílení dvojic elektronů dvěma atomy, které tak dosahují konfigurace nejbližšího vzácného plynu. Atomy se ve směru vazeb deformují a mohou nabývat složitých tvarů. Díky vysoké pevnosti této vazby mají krystaly vysokou teplotu tání, jsou tvrdé, nerozpustné a nevedou elektrický proud.

Kovová vazba

Je typická pro ryzí kovy. Valenční elektrony atomů tvořících kov jsou volně sdílené mezi všemi atomy, takže kovové ionty jsou obklopeny a prostoupeny tzv. elektronovým plynem. Z charakteru kovové vazby vyplývají vlastnosti kovových krystalů:

- velká tepelná a elektrická vodivost (přítomnost volných elektronů, které se pohybují z míst přebytku do míst nedostatku)
- vysoká kujnost a tažnost (neexistence směrových vazeb ve strukturách kovových krystalů, žádný kation se neváže na své sousedy, a proto vzniká náchylnost k plastické deformaci-kovy jsou měkké).
- kovový lesk, který souvisí s přítomností elektronového plynu ve struktuře kovů

Van der Waalsova vazba

Uplatňuje se především mezi molekulami kapalin a v krystalech vzácných plynů a organických látek. Objevuje se u grafitu, u kterého způsobuje vysokou štěpnost, nízkou tvrdost (grafit, síra, mastek) a nízký bod tání (síra).

Izomorfie

Je to schopnost atomů dvou nebo více prvků se vzájemně zastupovat ve struktuře krystalu. Tyto prvky (skupiny prvků) se označují jako izomorfní. Každý minerál obsahuje alespoň stopová množství izomorfních prvků. Nalézt v přírodě chemicky čistý minerál je výjimka. Např. u libovolného vzorku kalcitu (CaCO_3) se dá prokázat přítomnost menšího množství Mg, Mn, Fe atd. Tyto prvky zastupují atomy vápníku se struktuře kalcitu.

Izomorfie nám slouží ke zjišťování teplotně tlakových podmínek vzniku minerálu. Výrazný význam má izomorfie v technice při výrobě polovodičů. Provádí se zde obohacování krystalů polovodivých materiálů (Si, Ge) příměsí As, Sb, atd., čímž vzrůstá polovodivost krystalů. Dále se využívá při výrobě laserů-aktivní prvek je např. syntetický krystal Al_2O_3 obohacený chromem.

Voda v minerálech

Je přítomna ve formě hydroxylových anionů nebo ve formě molekul.

- Konstituční voda - v krystalové struktuře je přítomna ve formě $(OH)^-$ iontů (např. mastek).
- Krystalová voda - v krystalové struktuře přítomna ve formě molekul H_2O , které se váží tzv. vodíkovými můstky. Těmto minerálům říkáme hydráty (např. $CuSO_4 \cdot 5 H_2O$)
- Zeolitová voda - je typická pro minerály ze skupiny zeolitů, které mají velké dutiny ve strukturách. Zde může být zachycena voda, ale i jiné látky.
- Voda v amorfních minerálech - její množství je nestálé, proto se pro vyjádření používá symbol $n H_2O$. Např. opál $SiO_2 \cdot n H_2O$ ztrácí vodu a dochází ke vzniku křemene SiO_2 .

2.2 Zobrazení a modely

2.2.1 ICT na základních a středních školách

Na používání ICT – informační a komunikační technologie je nahlíženo jako na strategický a podpůrný nástroj pro prosazení nových výukových modelů. Nové metody vzdělávání pro informační společnost musí klást důraz na otevřenost a přístupnost. Interaktivní učení pomocí multimediálních vzdělávacích prostředků a přístup k velkým objemům informací na celém světě pomocí počítačových sítí, jsou ukázkami možností, které se stále více nabízejí. Vyspělé země si čím dál více uvědomují, že z hlediska budoucnosti žáků je podstatné, aby se žáci, ale i učitelé, sžili s novými technologiemi. Vědomosti a dovednosti, které takto získají, zvýší jejich budoucí konkurenceschopnost.

Aktuální materiály EU, které se týkají vzdělávání, skloňují ve všech pádech otázku aktivního využívání počítačů na všech stupních škol. V lednu 1997 byla založena tzv. Evropská síť expertů na vzdělávací technologie (EENet). Cílem této organizace je propagace a doporučení pro využívání nového fenoménu – ICT ve výuce s cílem pomoci individuálnímu růstu, evropské spolupráci a konkurenceschopnosti.

Všechny státy této organizace (mezi nimi i ČR) usilují zvláště o zvýšení počtu počítačů na školách, o budování síťové infrastruktury a o příslušnou kvalifikaci pedagogických pracovníků.

Znalosti ICT, které budou učitelé v příštích letech potřebovat, jsou široké. Nebudou jen uživateli kancelářských aplikací. Musí kromě běžných programů zvládnout též multimedia na CD-ROM a různé specializované programy. Musí umět najít vhodné zdroje informací na Internetu a rozhodnout, jestli jsou použitelné ve výuce. Navíc by měli být schopni žákům ukázat, jak se má s technologiemi pracovat, jak vyhodnocovat informace. Je toho mnoho. Přestože role učitele zůstává v základu nezměněna, posouvá se poněkud do polohy průvodce nebo asistenta studentů. Není pochyb o tom, že mají-li učitelé všechny tyto nové úkoly splnit, potřebují se na ně dobře připravit.

2.2.2 Počítačová podpora výuky chemie

Při výuce chemie by žáci měli dostat co nejvíce příležitostí k tomu, aby se zamýšleli nad zákonitostmi přírody a chováním látek. K pochopení vlastností látek je potřeba proniknout do problematiky jejich struktury a složení. Zprostředkovat tyto základní informace je však velmi těžké. Zde se jeví užití počítače z důvodu názornosti velmi vhodné. Počítač pomáhá žákům lépe chápat reálný svět.

Bez počítače lze realizovat též dobrou výuku chemie – ne však bez pozorování, reálného experimentování a pravidelného využívání modelů. Počítač by měl být součástí výuky chemie, protože se stal součástí každodenního života. Jeho využívání ve výuce by však nemělo být přemrštěné, ale přiměřené. Komputelizace výuky chemie nepředstavuje novou metodu, nový metodologický nástroj, ale umožňuje jako technický nástroj podstatně zvýšit efektivitu základních metod.

2.2.3 Modelování ve výuce chemie

Modely a modelování se řadí mezi jedny z nejvýznamnějších didaktických prostředků. Umožňují nám vizualizaci řady pojmů v mnoha tématech učiva chemie. Od dob J. Á. Komenského je názornost učiva prosazován jako jeden z faktorů, který může výrazně ovlivnit kvalitu výuky. Toto tvrzení vyplývá ze skutečnosti, že člověk získává v běžném životě 4/5 informací zrakem a jen 1/5 informací sluchem a ostatními smysly. Oproti tomu je v tradiční školní výuce získáváno 4/5 informací sluchem a jen 1/5 zrakem a ostatními smysly.

V chemii se stále více prosazují teoretické poznatky, které se velmi obtížně dokumentují a zobrazují běžnými materiálně didaktickými prostředky. Jde například o strukturu atomu, vznik chemické vazby mezi atomy, složení a struktura molekul.

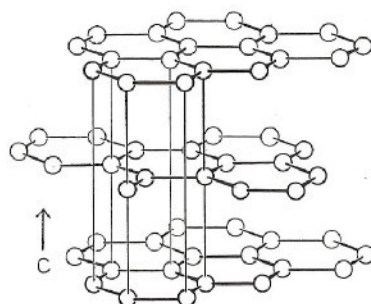
Jedním z témat učiva chemie je i chemická struktura krystalických látek (minerálů), kde se jeví využití ICT jako velmi vhodné. Modely vytvořené pomocí určitých počítačových programů dávají možnost žákům nahlédnout do struktury těchto látek a vést je k pochopení vlastností a chování sloučenin. Další výhodou ICT je vyhledávání modelů struktury minerálů na internetu.

2.2.4 Klasické modely zobrazení struktur minerálů

Modely slouží k názorné prezentaci struktury látek, prostorového uspořádání atomů v molekule.

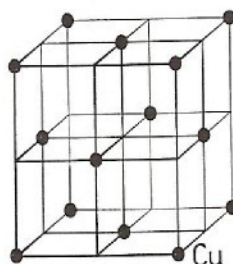
Ke klasickým modelům sloučenin ve výuce chemie patří materiální modely – kuličkové, tyčinkové, trubičkové, kalotové. Jednoduchými modely sloučenin jsou i vzorce.

Ukázka znázornění struktury minerálů dříve:



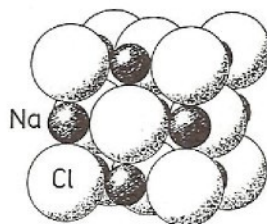
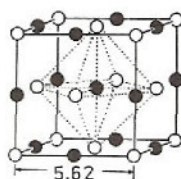
Grafit. Vrstevní krystalová struktura, ve které šestiúhelníky atomů uhlíku jsou přesně nad sebou. Podle Bragga, str. 33, 1965.

2.8 Ukázka znázornění struktury minerálu – grafit



Krystalová struktura mědi. Plošně centrovaná kubická mřížka

2.9 Ukázka znázornění struktury minerálu – měď



Halit. Schéma krystalové struktury a model

2.10 Ukázka znázornění struktury minerálu – halit

2.2.5 Zobrazení struktur minerálů na webu

<http://www.webmineral.com/> - databáze minerálů. Obsahuje definice minerálu, krystalové soustavy s obrázky a návody pro složení papírového modelu, modely struktur minerálů, které lze různě otáčet, abecední seznam minerálů s fotkami atd.

<http://www.natur.cuni.cz/~mineral/> - české webové stránky pro školy a jiné zájemce. Obsahují definice, vlastnosti, přehled a vznik minerálů, tvary krystalů, hry pro žáky. Nevýhodou je, že obrázky nelze nijak natáčet.

<http://www.xray.cz/krystalografie/str08a.htm> - stránky s animacemi struktur krystalů různých prvků.

<http://www.uwsp.edu/chemistry/pdbs/> - stránky v angličtině, které obsahují mimo jiné i kategorii anorganické chemie s vizualizacemi krystalových struktur.

<http://cs.wikipedia.org> – internetová encyklopedie s mineralogickou oblastí, obsahuje všechny důležité minerály, informace a obrázky.

<http://www.mineralienatlas.de> – atlas minerálů v německém jazyce, který obsahuje 3D vizualizace krystalových struktur.

http://www.ped.muni.cz/wbio/studium/stud_mat/Mat-mat.htm - stránky obsahující přehled minerálů, hornin, tektitů a meteoritů. Jsou určeny především pro studenty učitelství. Obsahují hry pro žáky, 3D animace krystalových soustav a mřížek minerálů.

3. PRAKTICKÁ ČÁST

3.1 Využití vizualizačních programů v mineralogii

Hlavní úloha vizualizačních programů spočívá v zobrazování chemických struktur. Programy jsou určeny pro vědecký výzkum, ale začínají se uplatňovat i při výuce chemie. Motivují při prezentaci nového učiva, dají se využít při samostatné práci žáků a také v laboratořích.

Krystaly lze jen obtížně prezentovat jako dvourozměrný obrázek vzhledem ke komplikované struktuře a množství částic obsažených v elementární buňce. Vizualizační programy nám přinášejí množství elegantních prostředků, které usnadňují pohled dovnitř struktury. Zobrazení zlepšuje také možnost rotace struktury, libovolné zvětšení a možnost vytvářet průřez strukturou.

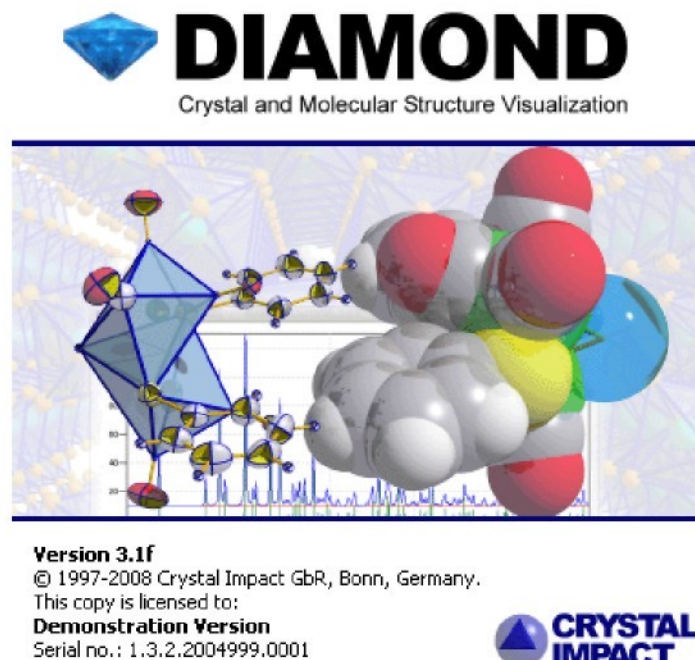
3.1.1. Základní pojmy z počítačové terminologie

Software	– programové vybavení počítače, sada všech počítačových programů umístěných v počítači.
Databáze	– uspořádaná množina informací (dat) uložená na paměťovém médiu.
Demo verze	– verze programu, kde některé funkce nejsou dovoleny.
Internet	– World Wide Web (WWW), multimediální síť internetu
Instalace	– zaevidování počítačového programu pro jeho budoucí provoz
PC	– personal computer, osobní počítač
Procesor	– ústřední výkonná jednotka počítače, která čte z paměti instrukce a na jejich základě vykonává program
Operační systém	– řídicí program počítače

Operační paměť	– RAM, počítač ji používá pro svou činnost a její obsah se po vypnutí počítače smaže.
MB	– megabajt, milion bajtů, bajt je jednotka množství dat
High color	– nastavení rozlišení grafické karty
EXE	– přípona počítačového souboru, která označuje spustitelný soubor
DSF	– formát souboru softwaru Diamond
HTTP	– Hyper Text Transfer Protocol. Protokol, sloužící na internetu a jiných sítích k přenosu hypertextových souborů typu HTML.
Soubor	– uspořádaná kolekce dat uložená na datovém médiu (př.: pevný disk, disketa, CD)
Adresář	– složka, organizační jednotka v souborovém systému
Ikona	– grafický soubor, který reprezentuje určitou funkci
Dokument	– soubor, který slouží k uložení dat
Formát souboru	– způsob organizace počítačových dat uložených na nějakém paměťovém médiu
Freeware	– software, který je distribuován bezplatně. Volně šiřitelný program, bez placení autorského honoráře.
Download	– přenos dat ze vzdáleného počítače na náš počítač
BMP	– formát grafických souborů

3.2 Chemický vizualizační software DIAMOND 3.1

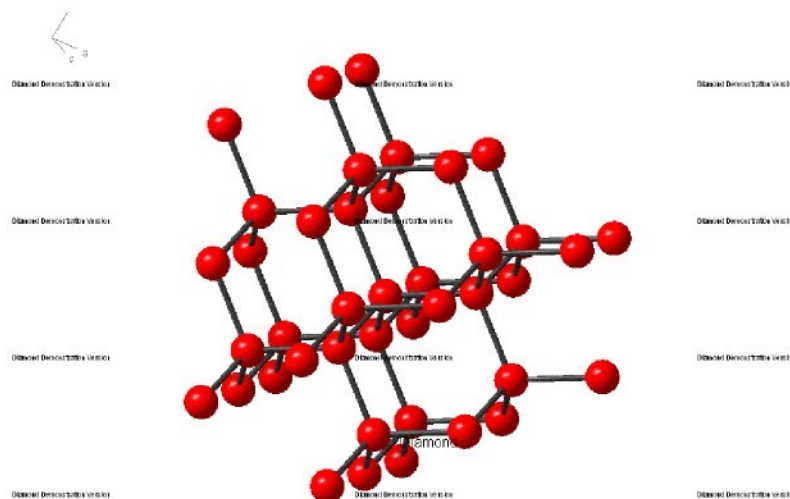
V následujících kapitolách se pokusím popsat postup získání softwaru Diamond, jeho nainstalování, základní práci s programem, nejčastěji používané funkce pro prezentace a export dat do jiných vizualizačních programů.



Obr. 3.1 Demonstrační verze softwaru Diamond od společnosti Crystal Impact

3.2.1 Získání software

Demonstrační verze je distribuována na rozdíl od mnoha jiných softwarů bez jakéhokoli časového omezení, s databází 40 minerálních struktur, s možností automatické aktualizace nainstalované verze softwaru, s uživatelským návodem a identickými funkcemi s plnou verzí programu vyjma ukládání změn ve strukturách do originálního formátu Diamondu (Diamond Document format *.diamdoc a Diamond Structure File format *.dsf) a nápisu "Diamond Demonstration Version" několikrát vyobrazeného při ukládání grafických výstupů nebo při tištění zobrazovaných struktur.



Obr 3.2 Ukázka omezení demonstrační verze u grafických výstupů, při přípravě prezentací především toto omezení ztěžuje a zpomaluje práci

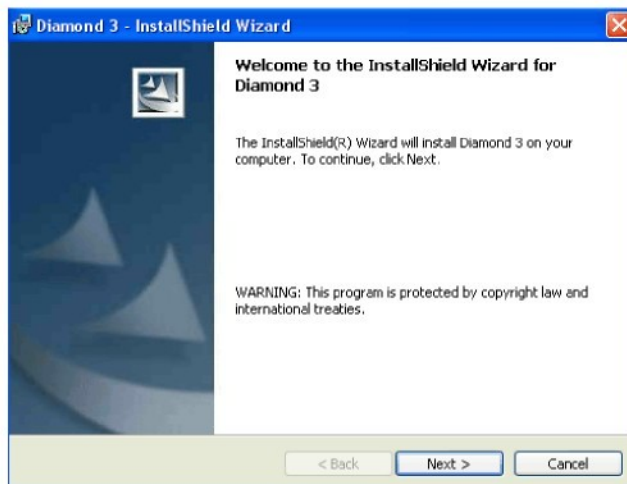
Bezplatnou demoverzi programu lze získat na webových stránkách společnosti Crystal Impact GbR v sekci Diamond - <http://www.crystalimpact.de/diamond/download.htm>. Ze stejného odkazu lze ještě stáhnout uživatelský návod, který je sice v angličtině, ale při prvních kontaktech s programem může být vcelku užitečnou pomůckou.

3.2.2 Instalace software

Minimální systémové požadavky k instalaci softwaru jsou:

- PC s procesorem Intel Pentium II nebo AMD Athlon procesor
- Operační systém Microsoft Windows 98, ME, 2000, XP, 2003 Server, nebo Vista
- Internetový prohlížeč Microsoft Internet Explorer 5.01
- Operační paměť 64 MB RAM
- 100 MB volného místa na disku
- grafické rozlišení 1024x768, high color

Spustíme instalační soubor dm3demo.exe, odklikneme uvítací obrazovku



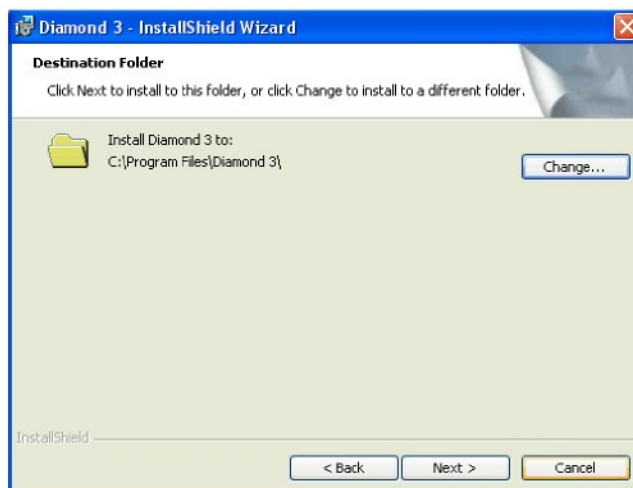
Obr. 3.3 Uvítací obrazovka instalace softwaru

zaškrtneme a potvrdíme souhlas s licencí,



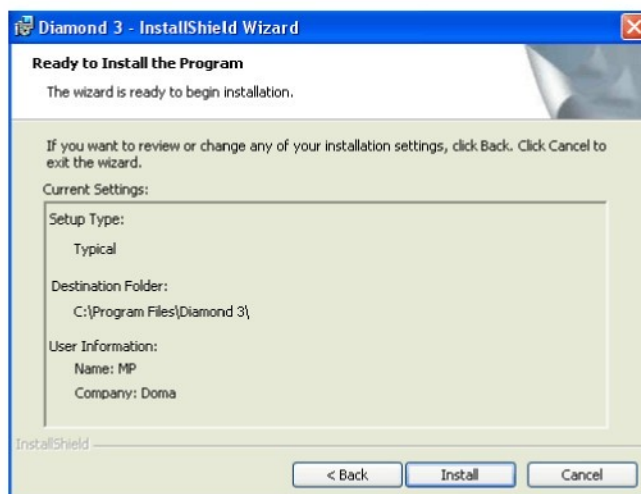
Obr. 3.4 Licenční ujednání softwaru

vybereme umístění programu,



Obr. 3.5 Výběr umístění instalace

potvrdíme instalační nastavení a dokončíme instalaci.



Obr. 3.6 Potvrzení nastavení instalace

3.2.3. Práce s programem

V této kapitole se zaměřím na popis základních funkcí programu, jeho ovládání, transformaci dat do formátů korespondujících s dalšími vizualizačními a kreslícími programy a sestavení jednoduchého postupu vedoucího k vytvoření prezentace, která by byla následně použita ve výuce.

3.2.3.1 Spuštění programu

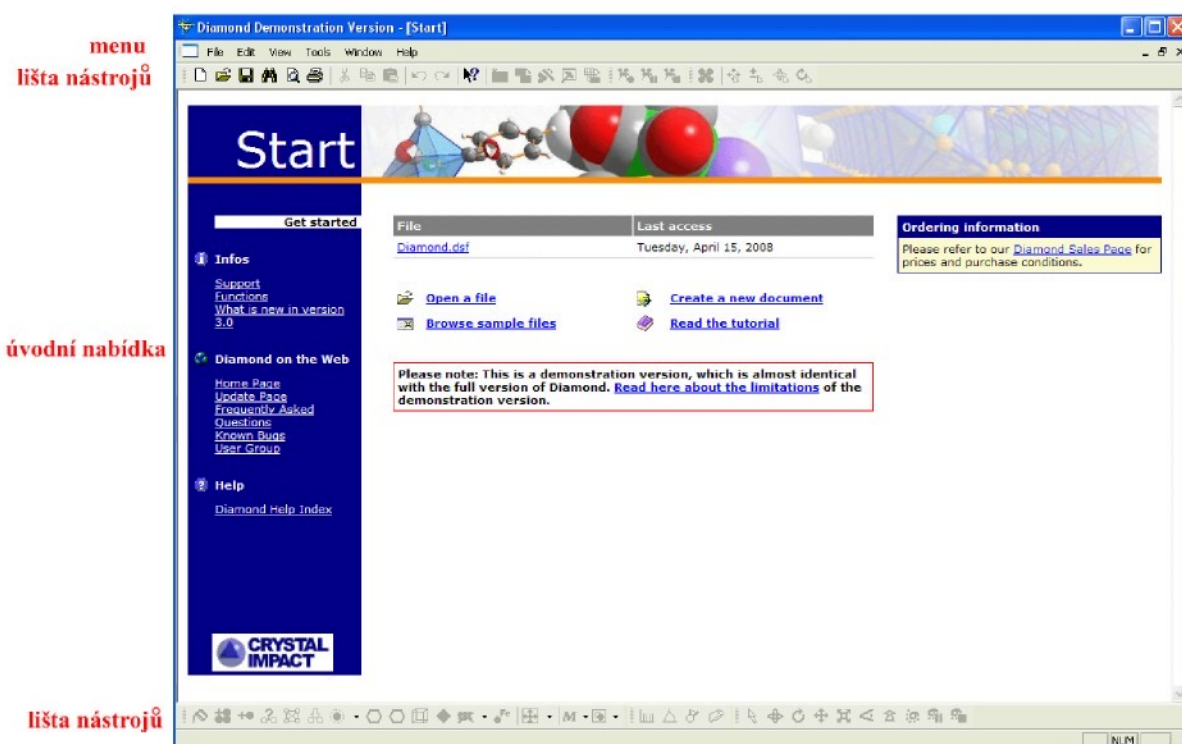
Program spustíme kliknutím na ikonu Diamond 3.1 Start/Run z Windows 95/98/2000/ME/NT či XP



Diamond 3.1

, nebo z nabídky vybereme Diamond 3, nebo spuštěním souboru diamond3.exe z adresáře, kde je program nainstalován.

Po spuštění programu se software automaticky pokusí o aktualizování nainstalované verze a objeví se úvodní obrazovka.

menu
lišta nástrojů

úvodní nabídka

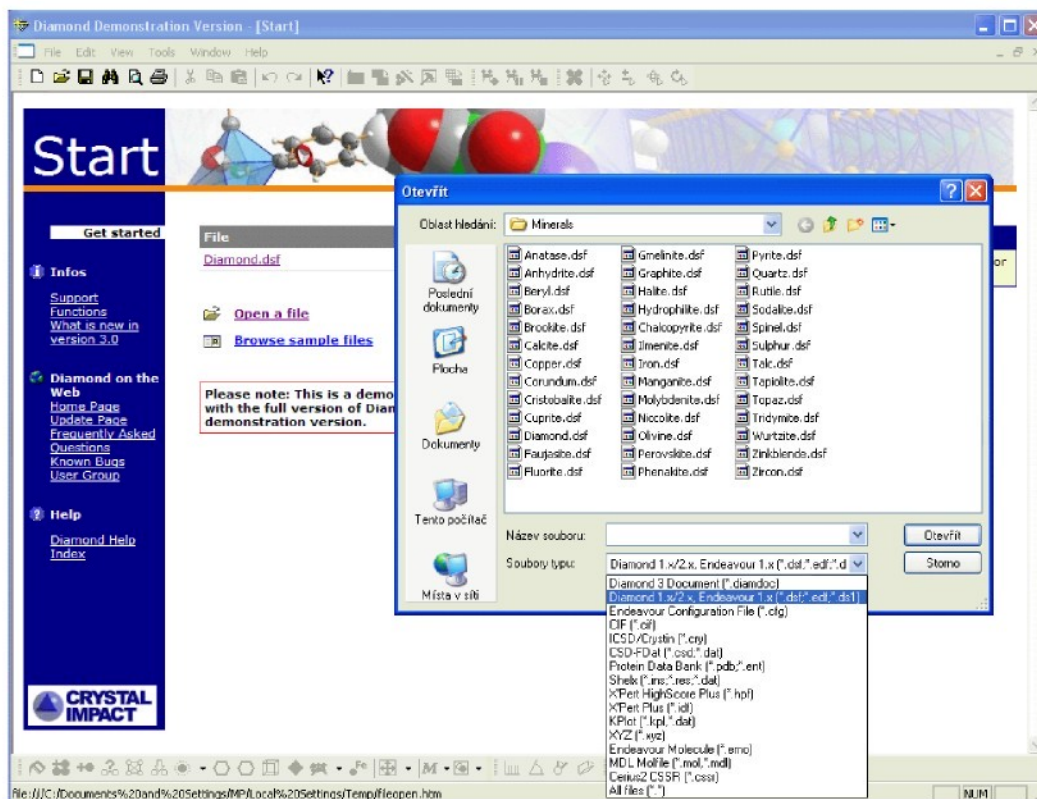
lišta nástrojů

Obr. 3.7 Úvodní obrazovka po spuštění softwaru

Na obrázku je základní okno programu. V horní části je uživatelské menu, pod ním je umístěno pro rychlejší a snadnější používání několik ikon nejčastěji používaných nástrojů. V levé části je úvodní nabídka, kde je přímý odkaz na nápovědu,  [Read the tutorial](#) webové stránky programu a odkaz na stránku s případnou aktualizací. Uprostřed obrazovky je zobrazen název, datum a čas souboru, s kterým bylo naposledy pracováno. Tato maličkost může při dlouhodobé práci ušetřit relativně mnoho času. Dále jsou tam ikony pro zahájení práce s programem a ikona s uživatelským návodem .

Práci zahájíme kliknutím na ikonu *Otevřít soubor*  [Open a file](#), v dialogovém okně

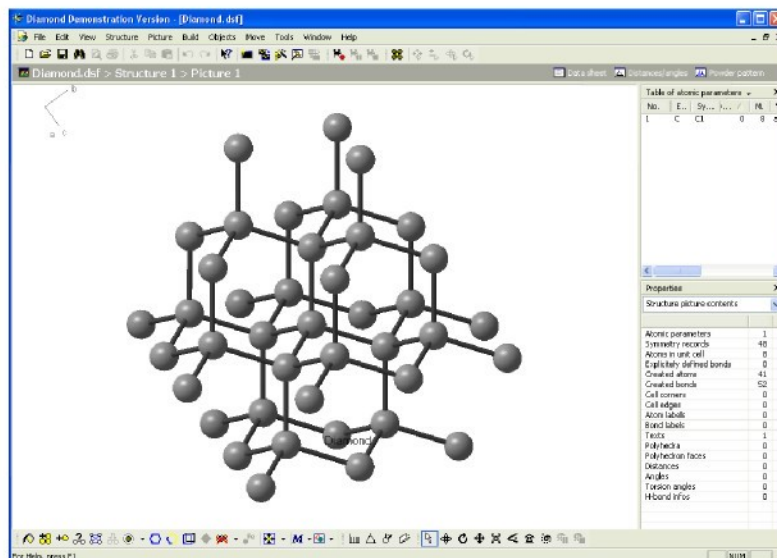
v kolonce *Oblast hledání* nastavíme adresář Minerals, kde jsou umístěny definované struktury. Tento podadresář se nachází v adresáři Diamond 3, kde je program také nainstalován, v podadresáři Samples (např.: c:\ProgramFiles\Diamond 3\Samples\Minerals). Z rozbalovacího seznamu *Soubory typu* vybereme typ *.dsf a ze zobrazené nabídky struktur některou vybereme (např. diamond.dsf).



Obr. 3.8 Ukázka otevření

Po výběru struktury přejdeme do zobrazení, kde lze se zvolenými strukturami pracovat..

3.2.3.2 Popis prostředí



Obr. 3.9 Základní pracovní prostředí softwaru

Na obrazovce je opět k dispozici uživatelské menu s nabídkou všech dostupných funkcí softwaru, dvě lišty nástrojů, vizualizační pole se zobrazovanou strukturou a na pravé straně tabulka s rozbalovacím seznamem s nabídkou tabulek dat o zobrazované struktuře. Pod ní je ještě tabulka vlastností struktury.

3.2.3.3 Základní funkce softwaru

K základním funkcím softwaru patří vytvoření nového dokumentu, otevření definované struktury, uložení dokumentu (v demoverzi nelze použít), uložení struktury do různých formátů pro použití v jiných vizualizačních programech, uložení modelu v grafickém formátu (omezeno demonstrační verzí), tisk modelu (též omezeno demonstrační verzí), funkce kopírování do schránky a vkládání ze schránky, funkce o krok zpět a vpřed, ukončení práce v programu atd.. K použití těchto funkcí slouží nástrojová lišta **Standard**, případně nabídka **File** a **Edit**.



New Empty Document (Ctrl+N) nebo z nabídky **File** volba **New...** - funkce vytvoření nového dokumentu, rozpracovaný dokument se nezavírá, zůstává na pracovní liště softwaru a je možné se k němu vrátit



Open (Ctrl+O) nebo z nabídky **F**ile volba **O**pen... - otevření souboru, tato funkce nám umožní otevřít již předdefinovanou, nebo námi vytvořenou a uloženou strukturu. Při otevření předdefinované struktury je třeba nezapomenout změnit typ souboru na *.dsf, jak je o tom již podrobně pojednáno v kapitole 3.2.3.1 Spuštění programu



Save (Ctrl+S) nebo z nabídky **F**ile volba **S**ave, **S**ave **A**s, **S**ave **A**ll

Save – uložení dokumentu do Diamond 2 (DSF) formátu nebo Diamond 3 (Diamdoc) není v demoverzi možné

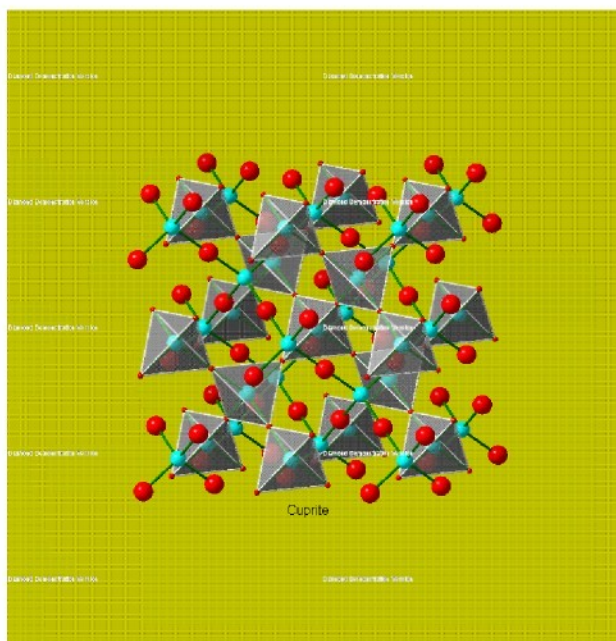
Save **A**s - po kliknutí na položku uložit jako se nám rozbílí výběr dalších tří podnabídek:

Save **D**okument **A**s... - funkce uložit dokument **v různých formátech je dostupná pouze v plné verzi softwaru**

Save **S**tructure **A**s... - uložit strukturu jako..., tato funkce je důležitá při exportu námi zobrazované struktury do jiných vizualizačních a kreslících programů (např. ChemSketch, ViewerLite, Mercury...) prostřednictvím

změny formátu souborů. O této funkci, o změně formátů souborů a o exportu resp. importu dat do jiných programů bude podrobně pojednávat ještě samostatná kapitola

Save **G**raphics **A**s... - tato funkce umožňuje uložit obrázek zobrazované struktury v různých grafických formátech (*.gif, *.jpg, *.png, *.tif, *.wmf, *.wrl). Jak již bylo dříve zmíněno, tato funkce je v demoverzi limitována několikerým zobrazením nápisu „Diamond Demonstration Version“ v ukládaném grafickém souboru.

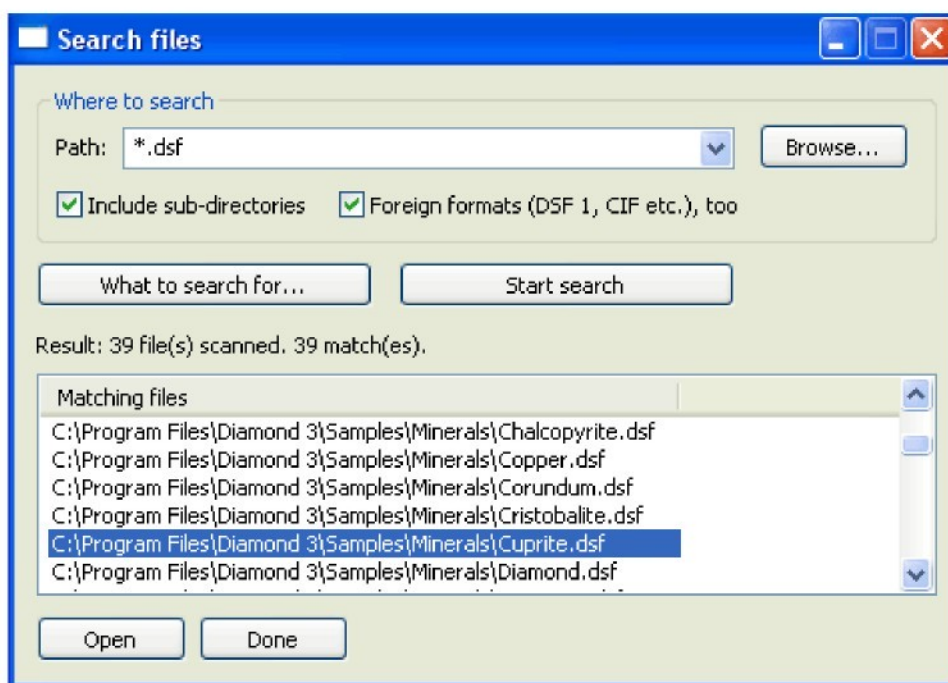


Obr. 3.10 Ukázka omezení demonstrační verze

Save All – obdoba funkce **Save**, uložení dokumentů do Diamond 2 (DSF) formátu nebo Diamond 3 (Diamdoc) není v demoverzi možné



Search files nebo z nabídky **File** volba **Search...** - vyhledání souborů, tato funkce je užitečná v případě, že nevíme, kde se na disku nacházejí námi uložené nebo předdefinované soubory se strukturami. Po kliknutí na tuto funkci se zobrazí okno *Search files* s příkazovým řádkem, do kterého se napíše buď celý název hledaného souboru a nebo pouze formát hledaného souboru (např.: *.dsf). Poté klikneme na položku *Start search* a v okně výsledků se zobrazí seznam nalezených souborů a my můžeme rovnou označit námi požadovaný soubor a tlačítkem *Open* ho otevřít.



3.11 Ukázka vyhledání souborů s předdefinovanými strukturami



Print Preview nebo z nabídky **F**ile volba **P**rint **P**review – náhled před tiskem, tato funkce nám umožní zobrazit strukturu tak, jak bude vypadat po vytištění



Print (Ctrl+P) nebo z nabídky **F**ile volba **P**rint – tisk zobrazeného modelu. V demonstrační verzi se při tisku též zobrazuje nápis „Diamond Demonstration Version“.



Undo (Ctrl+Z) nebo z nabídky **E**dit volba **U**ndo – o krok zpět, tato funkce umožňuje se vrátit o operaci zpět



Redo (Ctrl+Y) nebo z nabídky **E**dit volba **R**edo – o krok vpřed, tato funkce umožňuje posun o operaci vpřed (pokud již nějaká taková nastala)



Copy nebo z nabídky **E**dit volba **C**opy – zkopíruje označenou část do schránky Windows, ze které ji lze následně vložit do jiného dokumentu



Paste nebo z nabídky **E**dit volba **P**aste – vloží ze schránky Windows uloženou část dokument

3.2.3.4 Pohybování s modelem

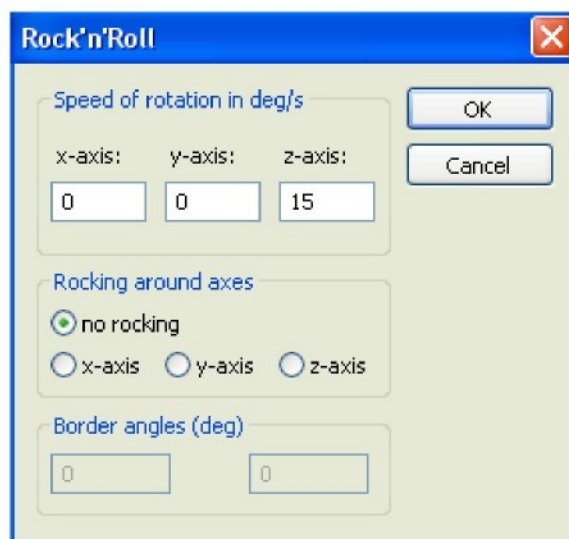
K otáčení, posouvání, přibližování a dalším pohybům slouží nabídka a lišta nástrojů *Move*.

-  *No tracking* nebo z nabídky **M**ove volba **No tracking** – pokud je tato funkce aktivní, nedochází k žádnému pohybu modelu.
-  *Rotate along x/y-axis* nebo z nabídky **M**ove volba **Rotate along x/y-axis** – při zapnuté funkci dochází držením stisknutého levého tlačítka myši a tažením po pracovní ploše k rotaci modelu kolem os x a y
-  *Rotate along z-axis* nebo z nabídky **M**ove volba **Rotate along z-axis** - při zapnuté funkci dochází držením stisknutého levého tlačítka myši a tažením po pracovní ploše ve vertikálním směru k rotaci modelu kolem osy z
-  *Shift* nebo z nabídky **M**ove volba **S**hift – při zapnuté funkci dochází držením stisknutého levého tlačítka myši a tažením po pracovní ploše k posunu modelu ve směru tažení
-  *Enlargement factor* nebo z nabídky **M**ove volba **E**nlargement factor - při zapnuté funkci dochází držením stisknutého levého tlačítka myši a tažením po pracovní ploše ke zvětšení (přiblížení) resp. zmenšení (oddálení) modelu
-  *Perspective* nebo z nabídky **M**ove volba **P**erspective - při zapnuté funkci dochází držením stisknutého levého tlačítka myši a tažením po pracovní ploše ke změně úhlu pohledu zobrazovaného modelu
-  *Walk In/Out* nebo z nabídky **M**ove volba **W**alk In/Out - při zapnuté funkci dochází držením stisknutého levého tlačítka myši a tažením po pracovní ploše ke vstupu resp. výstupu pohledu do centra modelu



Spin nebo z nabídky **M**ove volba **S**pin – zapnutím této funkce není třeba v kombinaci s předchozími funkcemi držet stisknuté levé tlačítko a posouvat myší po pracovní ploše. Pohyb modelu je samovolný ve směru prvotního impulsu daného pohybem myši.

Z nabídky **M**ove volba **R**ock'n'Roll... - tato funkce umožňuje samovolnou rotaci modelu kolem os x, y a z. Výběrem této funkce se otevře editační okno *Rock'n'Roll*, kde lze v rámečku *Speed of rotation in deg/s* měnit rychlosti rotace kolem jednotlivých os, v rámečku *Rocking around axes* lze zaškrtnout kolébání kolem pouze některé z os a v rámečku *Border angles* nastavit hraniční úhly, mezi kterými necháme model kolébat kolem některé z os. Tato funkce se mi zdá být vhodná při prezentacích modelů přímo z výstupu počítače.



3.12 Ukázka dialogového okna funkce „Rock'n'Roll“



Pause/Continue Motion nebo z nabídky **M**ove volba **C**ontinue Motion – funkce umožňuje zastavení a následné spuštění prezentace pohybu z předchozích funkcí *Spin* a *Rock'n'Roll*



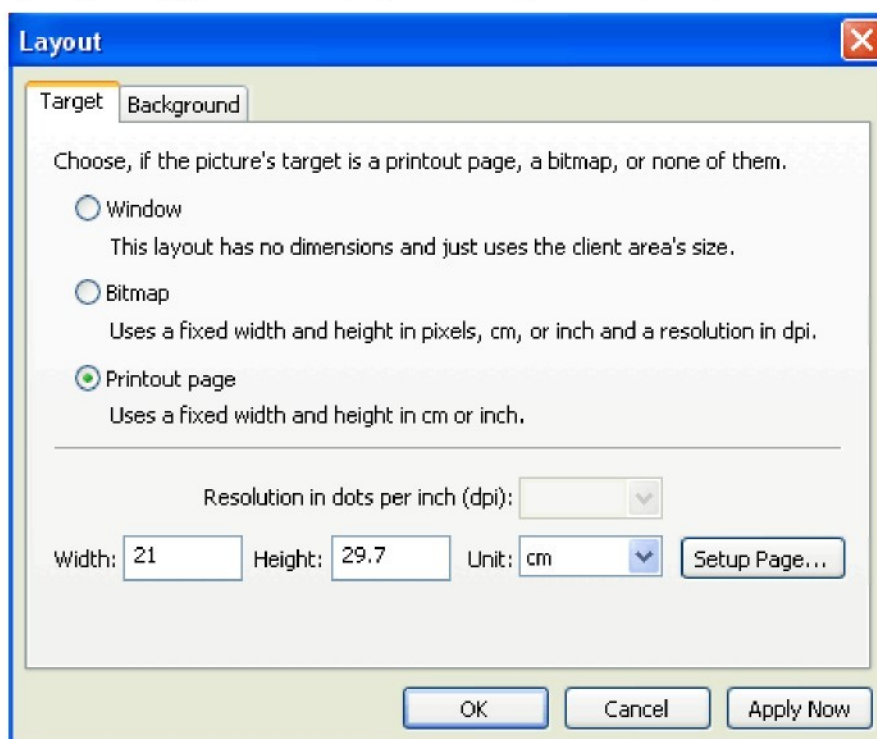
Stop Motion nebo z nabídky **M**ove volba **S**top Motion – zastavení prezentace pohybu

3.2.4 Změny modelu

V této kapitole bude ukázáno, jakým způsobem lze změnit tvar a barvy zobrazení modelu, rozšíření struktur o další atomy a některé další funkce, které se mohou při prezentacích hodit.

3.2.4.1 Nastavení pracovní plochy

Layout (z nabídky **P**icture volba **L**ayout) – tato funkce umožňuje změnu nastavení pracovní plochy softwaru pro zobrazení modelu. Pomocí dialogového okna *Layout* můžeme v záložce **Target** vybrat typ, rozvržení příp. velikost pracovní plochy.



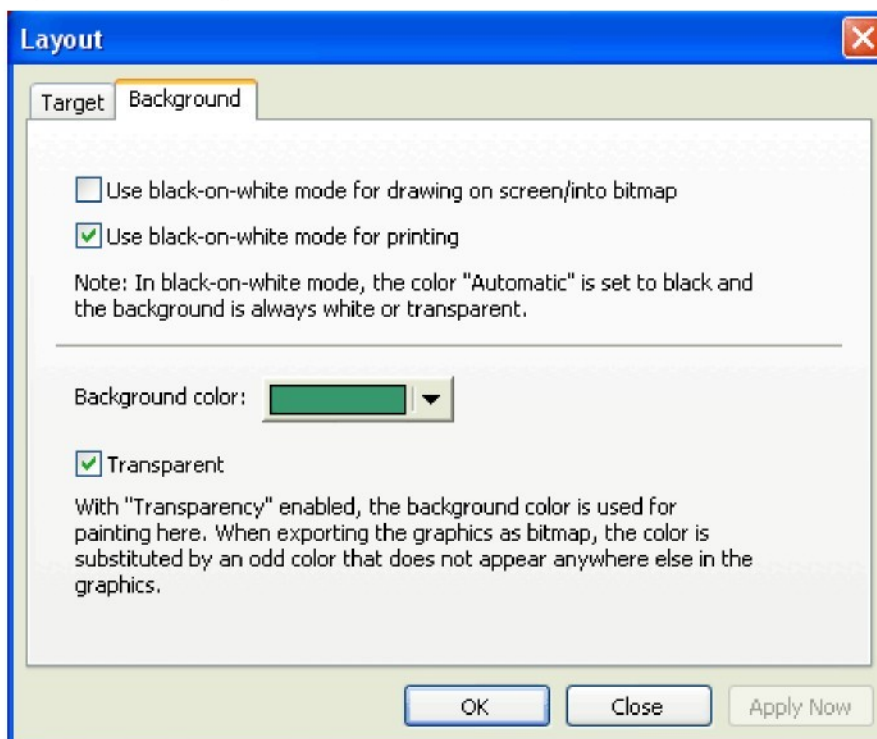
3.13 Ukázka dialogového okna funkce „Layout“ záložky „Target“

Window – tato položka je vhodná pro práci v softwaru a následnou prezentaci přímo z počítače

Bitmap – zde lze nastavit velikost pracovní plochy v různých jednotkách (Pixel, cm, inch [palec]) pro výsledný výstup v grafickém formátu

Printout page – zde lze nastavit velikost plochy pro tištěný výstup (cm, inch, , A4...)

V záložce **Background** můžeme nastavit barvu pozadí. První dvě zaškrťovací políčka udávají tzv. black-on-white mód, kdy je barva zobrazení nastavena na černou a pozadí je automaticky nastaveno na bílou popř. průhlednou. Ve spodní části je možnost výběru pozadí – *Background color*.



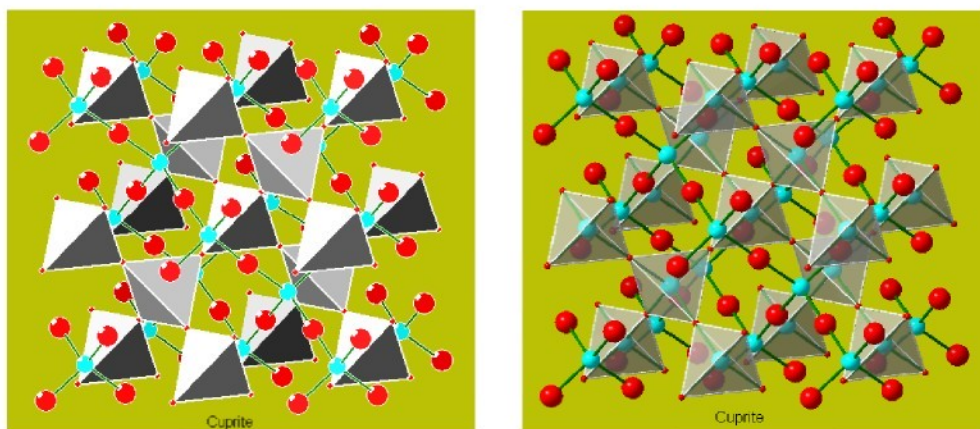
3.14 Ukázka dialogového okna funkce „Layout“ záložky „Background“

3.2.4.2 Nastavení znázornění

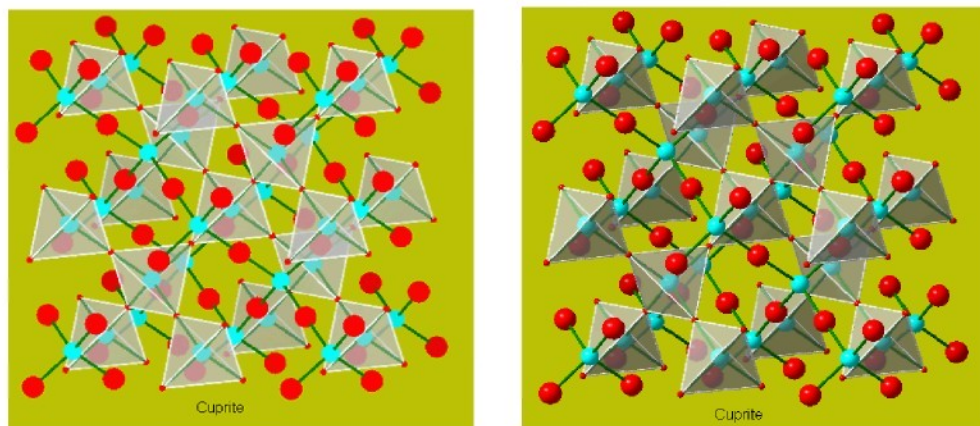


Representation Settings nebo z nabídky **P**icture volba **R**epresentation... - tato volba umožňuje nastavit grafický vzhled modelu pro výraznější znázornění. Kliknutím na ikonu *Representation Settings* rozbalíme seznam možných úprav.

Rendering – zaškrtnutím této funkce dosáhneme zvýraznění zobrazení tzv. fotorealistického vzhledu

3.15 Ukázka rozdílu při aktivované funkci *Rendering* (obr.vpravo)

Lighting – zaškrtnutím této položky dojde k nasvícení modelu - vystínování

3.16 Ukázka rozdílu při aktivované funkci *Lighting* (obr.vpravo)

Depth Cueing – hloubka obrazu, za celou dobu práce se softwarem Diamond mi není zcela zřejmé použití této funkce, rozdíl mezi aktivovanou a deaktivovanou položkou je minimální

Central Projection – vycentrování pohledu s nastavením vzdálenosti odstupu

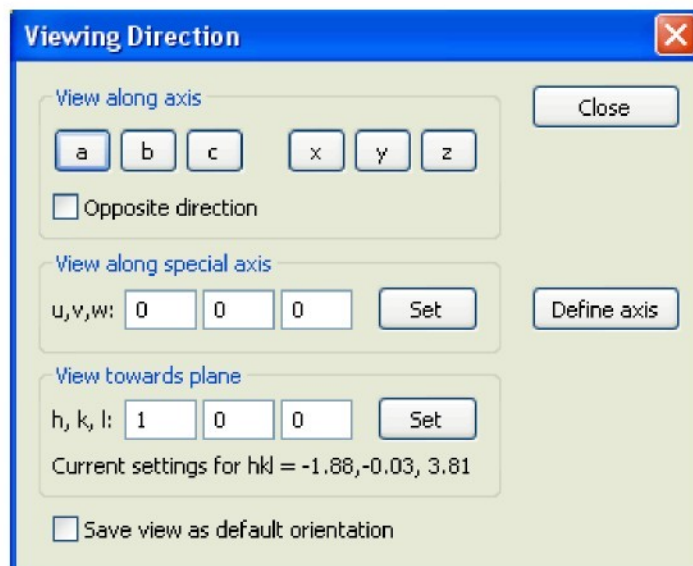
Stereo – zobrazení druhého modelu – lze nastavit odstup modelů v cm

Show Axes a,b,c – zobrazení os, názorné zobrazení především při prezentaci s rotací

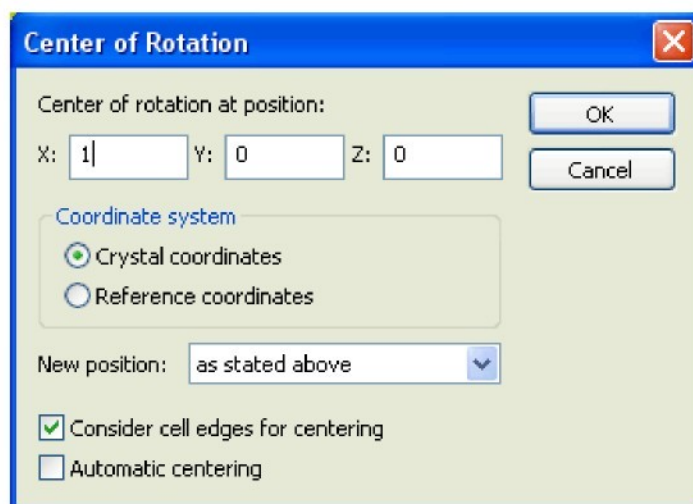
Open Polyhedron Faces – zobrazení výplně stěn mnohostěnu

3.2.4.3 Nastavení směru zobrazení, úhlu natočení a orientačního systému

Z nabídky **P**icture volba **V**iewing **D**irection – dialogové okno této funkce nám umožní nastavit pohled ve směru jednotlivých os *View along axis*, zobrazení podle speciálních os orientačního systému *View along special axis*, nastavení polohy orientačního systému *View towards plane* či definování vlastních os *Define axis*.

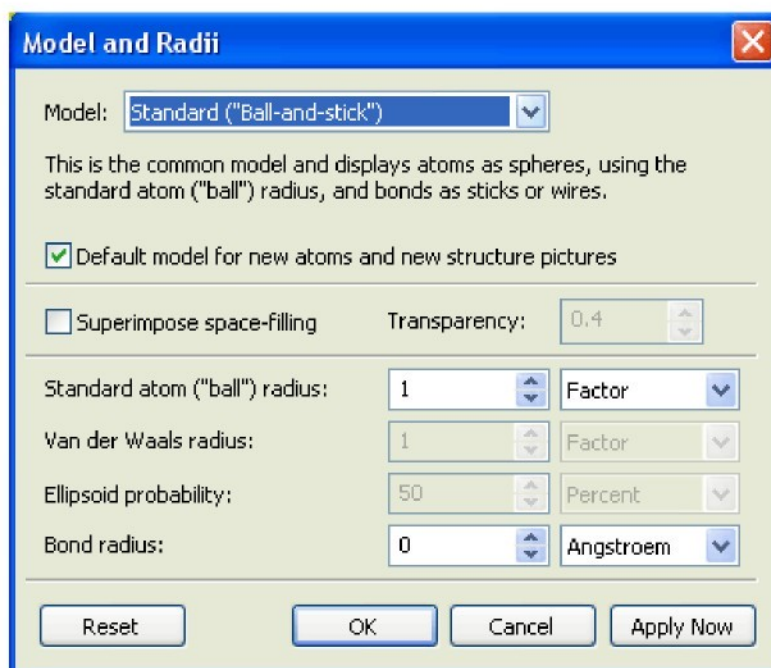
3.17 Dialogové okno funkce *V*iewing *D*irection

Z nabídky **P**icture volba **C**entre of **R**otation... - dialogové okno určené k nastavení souřadnicového systému *Coordinate systém* a pozici středu otáčení modelu *Center of rotation at position*

3.18 Dialogové okno funkce *C*enter of *R*otation

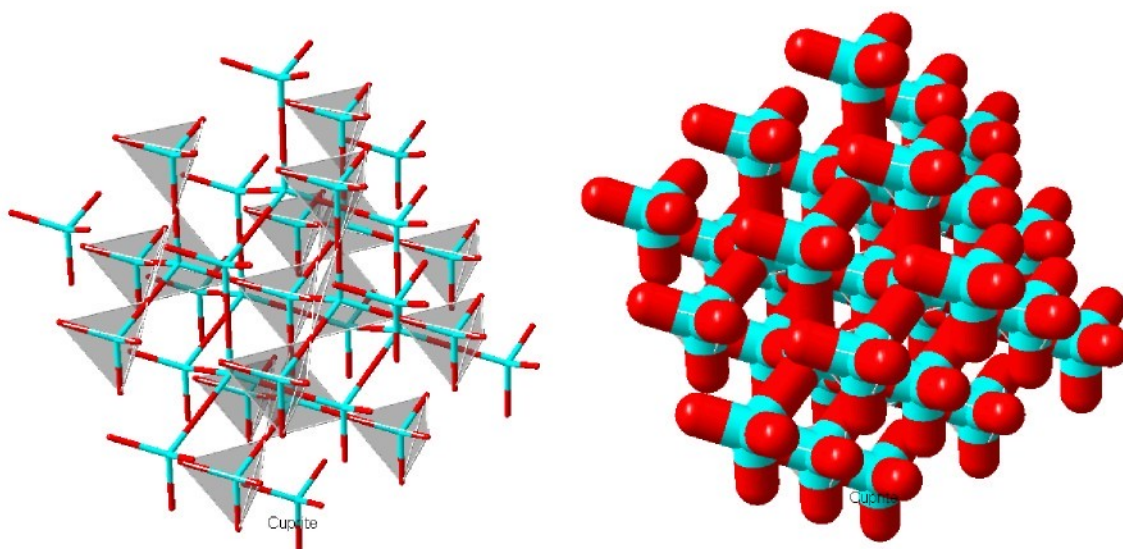
3.2.4.4 Změny nastavení zobrazení modelu

M Model nebo z nabídky **Picture** volba **Model and Radii** – v dialogovém okně v seznamu *Model* můžeme nastavit tvar modelu a další související vlastnosti prvků modelu



3.19 Dialogové okno funkce nastavení zobrazení modelu

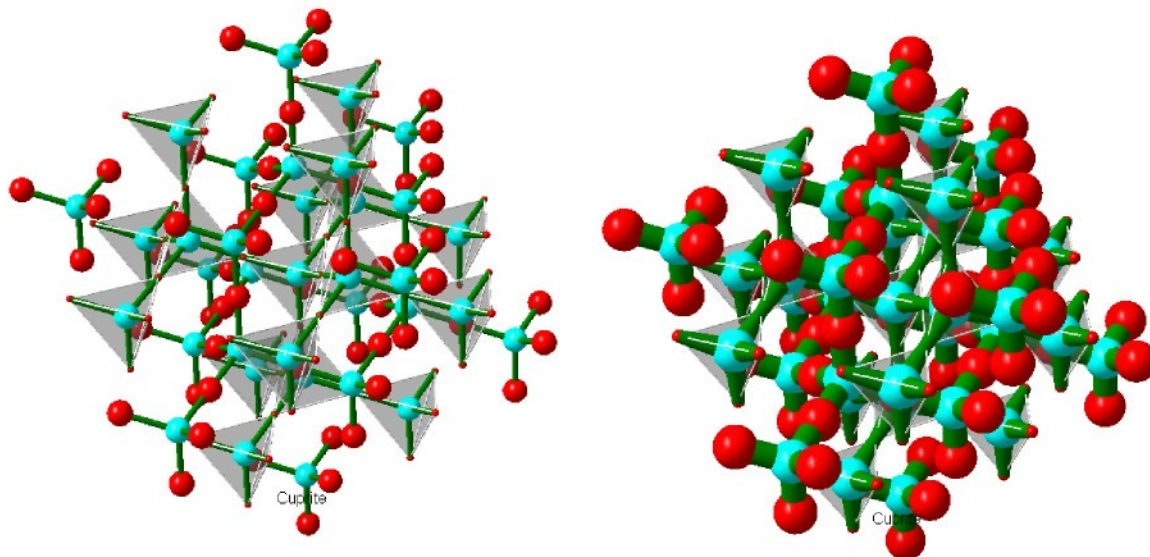
 *Wires/Sticks* – zobrazení atomových vazeb ve tvaru „drátu/tyče“, kde v kolonce *Bond radius* nastavuji poloměr zobrazovaného svazku, zatímco atomy nejsou zobrazovány



3.20 Ukázka zobrazení modelu „Wires/Sticks“ – rádius 0,1 resp. 0,7



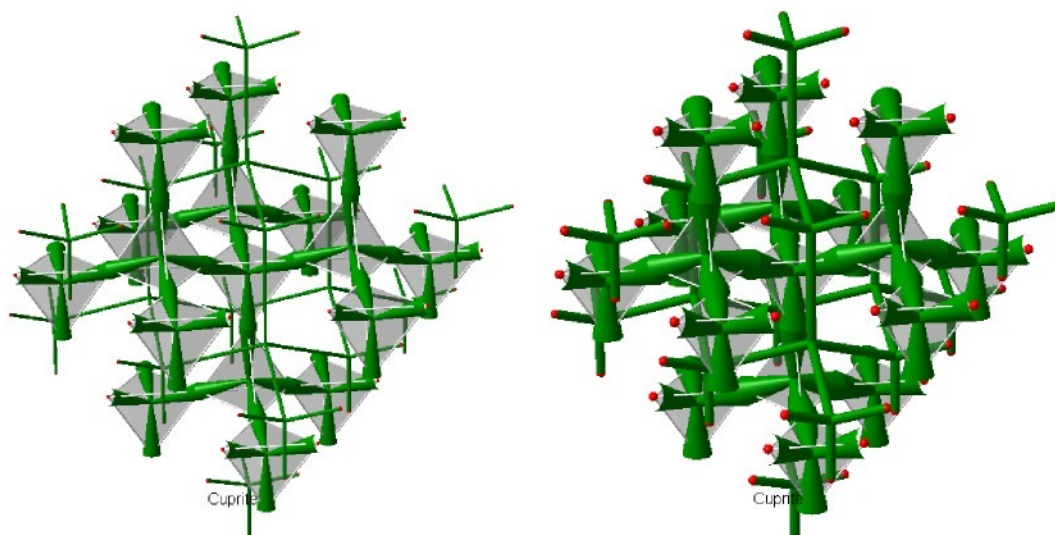
Standard („Ball and Stick“) – zřejmě nejčastěji používané zobrazení modelů, atomy jsou zobrazeny ve tvaru koule a atomové vazby ve tvaru drátů (tyček). Zde lze nastavit poloměr kuliček představujících atomy v kolonce *Standard atom („Ball“)* *radius* a poloměr průřezu drátu představující atomové vazby v kolonce *Bond radius*



3.21 Ukázka zobrazení modelu „Ball and Stick“ – nastavení rádiusů 0,4 a 0,1 resp. 0,7 a 0,4



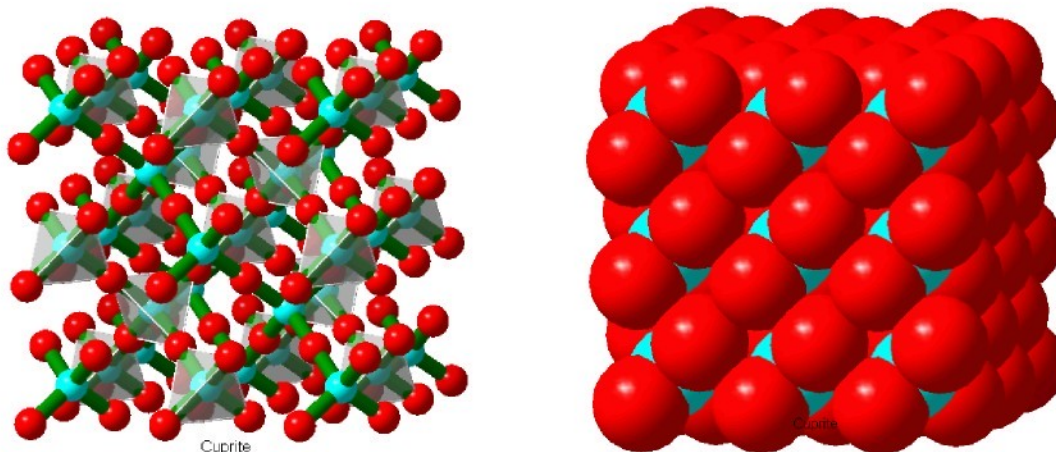
Ellipsoid – zobrazení atomů jako elipsoidů, vazby jsou zobrazovány ve tvaru *Sticks/Wires*. Změna velikostí se nastavuje v kolonkách *Ellipsoid probability* a *Bond radius*.



3.22 Ukázka zobrazení modelu „Ellipsoid“ – nastavení hodnot 2 a 0,3 resp. 50 a 0,5

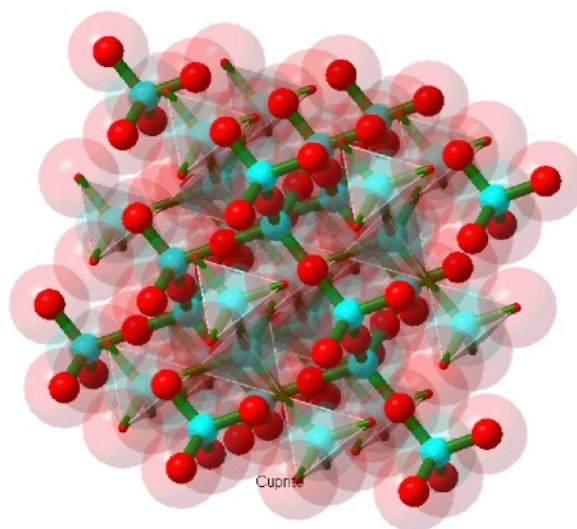


Space-filling – zobrazení tzv. vyplněním prostoru, zobrazované atomy jsou jako sféry, poloměry těchto sfér se nastavují v kolonce *Van der Waals radius*, vazby jako obvykle v *Bond radius*



3.23 Ukázka zobrazení modelu „Space-filling“ – nastavení hodnot 0,5 a 0,2 resp. 1,7 a 0,2

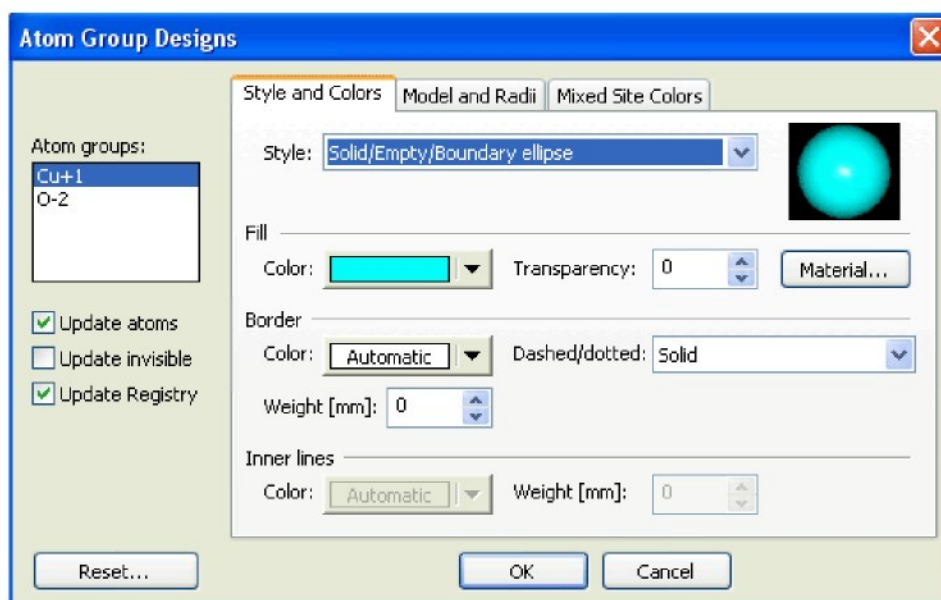
V dialogovém okně *Model and Radii* lze také pro zobrazení modelů „Ball and Stick“, „Wires and Stick“ a „Ellipsoid“ zaškrtnout funkci *Superimpose space-filling*, kde je pak model překryt průhlednou vrstvou výplně prostoru z předchozího bodu. Stupeň průhlednosti se nastavuje v políčku *Transparency*.



3.24 Ukázka zobrazení modelu „Ball and Stick“ s funkcí „Transparency“

3.2.4.5 Nastavení grafiky atomu

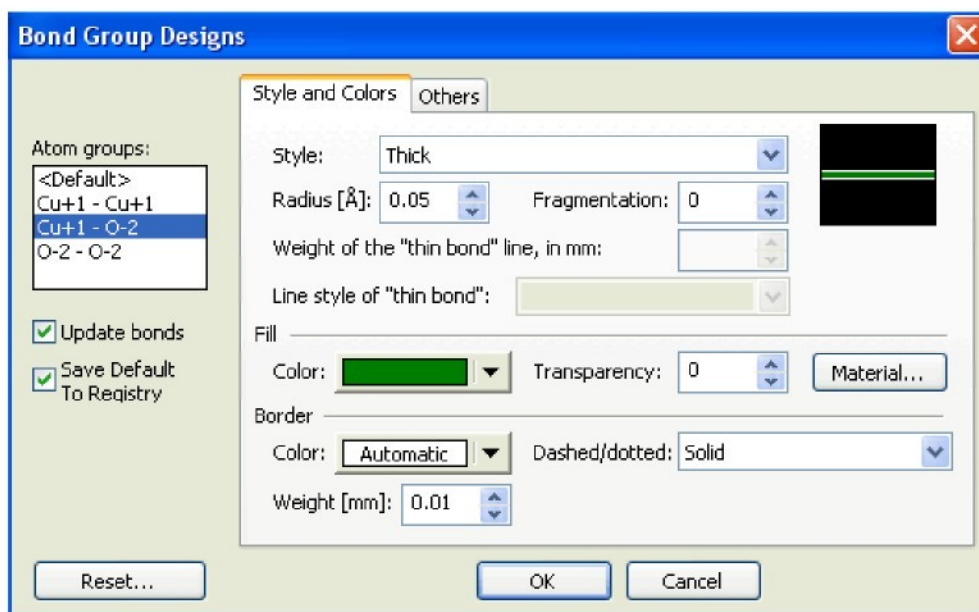
Z nabídky **P**icture volba **A**tom Designs – pomocí dialogového okna *Atom Group Designs* lze nastavit různé styly zobrazení atomu v záložce *Style*, barvu, stupeň průhlednosti a materiál v záložce *Fill* a ohraničení v záložce *Border*. Pro nastavení zobrazení jednotlivých atomových skupin přepínáme v rámečku *Atom groups* v levé části dialogového okna.



3.25 Ukázka dialogového okna funkce nastavení grafiky atomu

3.2.4.6 Nastavení grafiky atomových vazeb

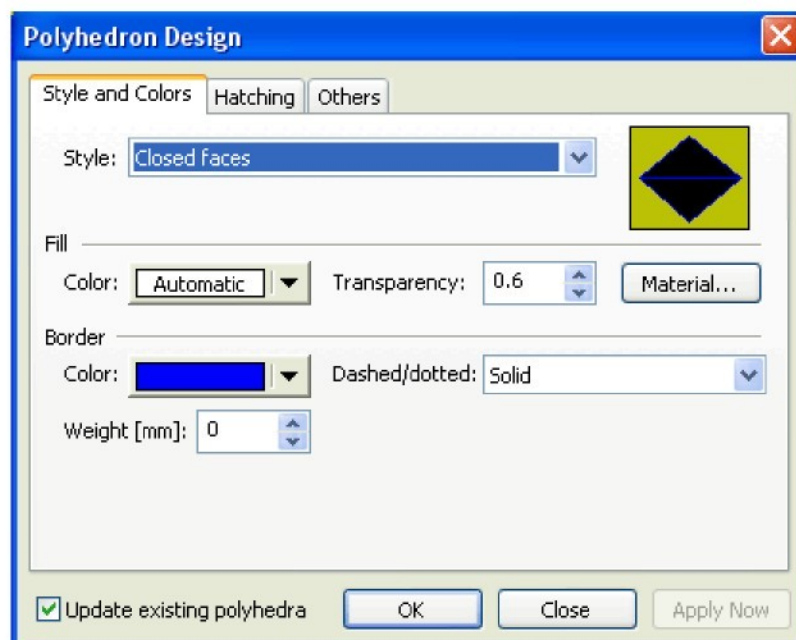
Z nabídky **P**icture volba **B**ond Designs – pomocí dialogového okna *Bond Group Designs* lze nastavit různé styly zobrazení atomových vazeb, změnu poloměru vazby *Radius* a případně styl čerchování *Fragmentation* v záložce *Style*, barvu, stupeň průhlednosti a materiál v záložce *Fill* a ohraničení v záložce *Border*. Pro nastavení zobrazení jednotlivých atomových vazeb přepínáme v rámečku *Atom groups* v levé části dialogového okna.



3.26 Ukázka dialogového okna funkce nastavení grafiky vazeb

3.2.4.7 Nastavení zobrazení mnohostěňů

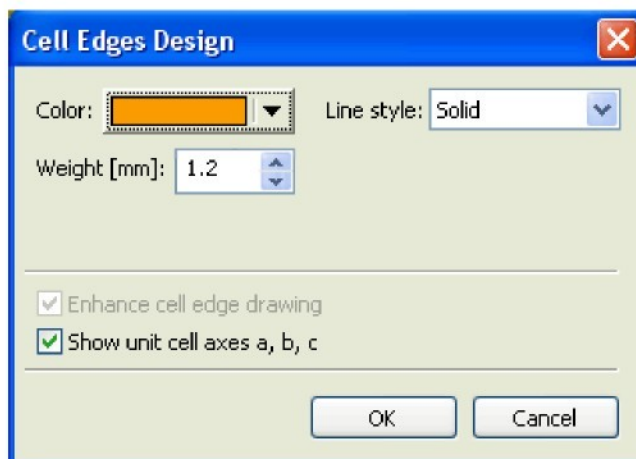
Z nabídky **Picture** volba **Polyhedron Designs** – pomocí dialogového okna *Polyhedron Designs* lze nastavit styly zobrazení mnohostěňů (otevřený, uzavřený, polootevřený) v záložce *Style*, barvu, stupeň průhlednosti a materiál v záložce *Fill* a ohraničení v záložce *Border*. V záložce *Hatching* lze ještě případně nastavit styl šrafování.



3.27 Ukázka dialogového okna funkce nastavení grafiky mnohostěňů

3.2.4.8 Nastavení zobrazení buňky

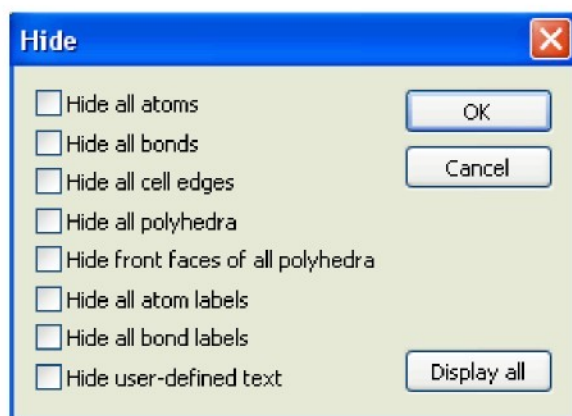
Z nabídky **P**icture volba **C**ell **E**dges **D**esigns – pomocí dialogového okna *Cell Edges Designs* lze nastavit styl, tloušťku a barvu linky. Ve spodní části lze ještě zaškrtnout zviditelnění souřadného systému *Show unit cell axes a, b, c*.



3.28 Ukázka dialogového okna funkce nastavení grafiky buňky

3.2.4.9 Skrytí některých prvků modelu

Z nabídky **P**icture volba **H**ide – pomocí dialogového okna *Hide* můžeme pro lepší názornost některé části zobrazovaného modelu skrýt (např. atomy, atomové vazby, mnohostěny...)



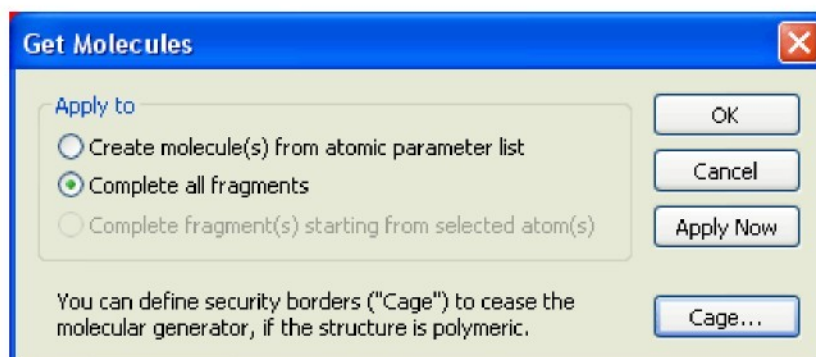
3.29 Ukázka dialogového okna funkce „Hide“

3.2.5 Automatické rozšíření modelu struktury

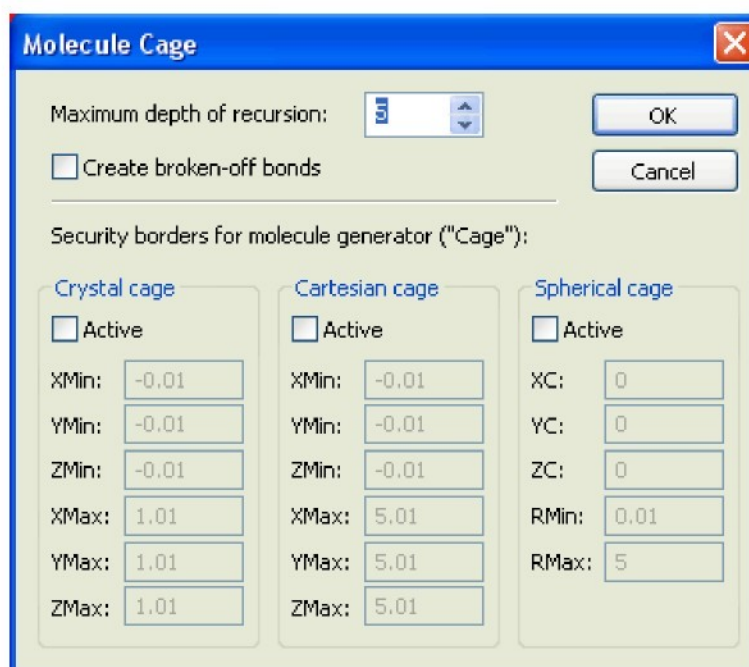


Complete fragments (Shift+Ctrl+F) nebo z nabídky **B**uild volba **G**et **M**olecules... - v dialogovém okně zaškrtnutím kolonky *Complete all fragments* dosáhneme rozšíření

celého modelu a v záložce *Cage...* můžeme v editačním řádku nastavit šíři rekurze. Hraniční nastavení tohoto rozšíření lze provést pouze u polymerických struktur.



3.30 Ukázka dialogového okna „Get Molecules“



3.31 Ukázka dialogového okna „Molecule Cage“



Fill Coordination Spheres Directly (Shift+Ctrl+S) – funkce analogická funkci *Complete fragments* při nastavení parametru *Cage* na hodnotu 1. Jedná se tedy o rozšíření o atomovou vazbu.



Fill Fixed Spheres Directly – analogie předchozí funkce s vypnutým zviditelněním vazeb

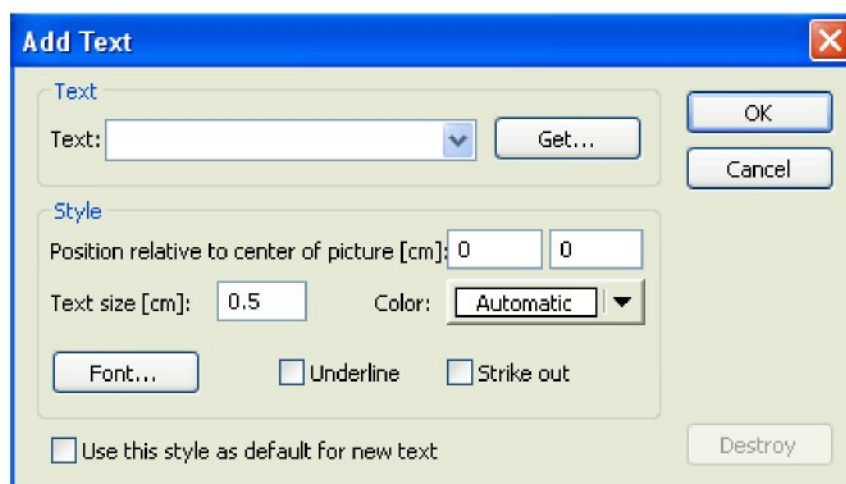


Create Broken-off Bonds Shift+Crrl+K) – taktéž, ale naopak vypnuté zviditelnění atomů

3.2.6 Vkládání textu, souřadného systému a legendy do zobrazení

3.2.6.1 Text

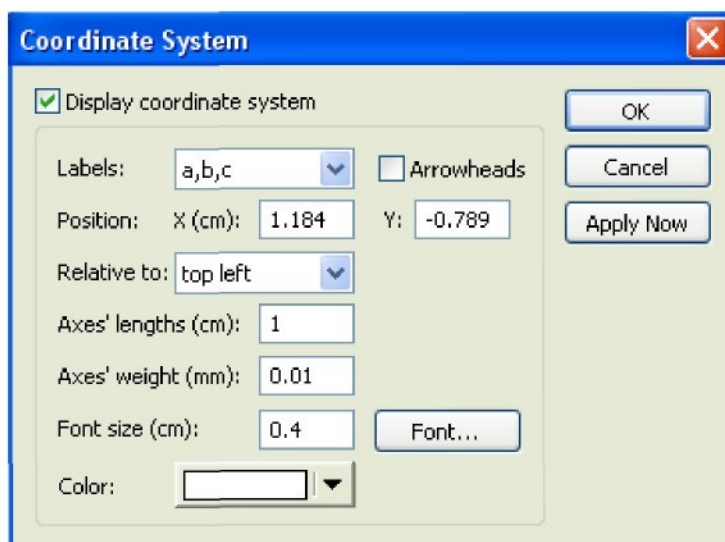
Z nabídky **Objects** volba **Text** můžeme vkládat do prezentace libovolný text, u kterého lze měnit známým způsobem styl jako u textových editorů



3.32 Ukázka vkládání textu ke struktuře

3.2.6.2 Souřadný systém

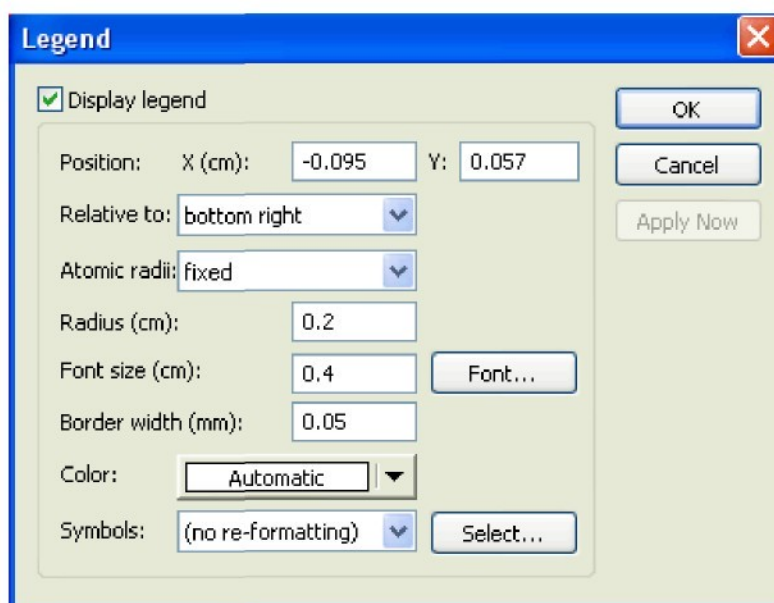
Z nabídky **Objects** volba **Coordinate systém...** nastavíme a vložíme souřadný systém



3.33 Ukázka vkládání a nastavení souřadného systému

3.2.6.3 Legenda

Z nabídky **Objects** volba **Legend...** nastavíme pozici umístění, styl značek a popisky legendy k zobrazované struktuře



3.34 Ukázka vkládání popisku (legendy) k zobrazované struktuře

3.2.7 Ukončení programu



z nabídky **File** volba **Exit** – ukončení práce s programem.

3.3 Přehled a stručný popis dalších vizualizačních programů

3.3.1 ACD/ChemSketch

Stručný popis

- kreslící program pro textové a grafické procesy
- používá se ke kreslení chemických struktur, reakcí a schematických diagramů
- strukturní způsob kreslení chemických struktur a počítání jejich vlastností
- použití pro editaci textu a grafiky
- pro výpočet a předpověď molekulových vlastností
- lze ho použít jako vstupní aplikaci k dalším softwarům (ACD/3DViewer)

Zdroj získání

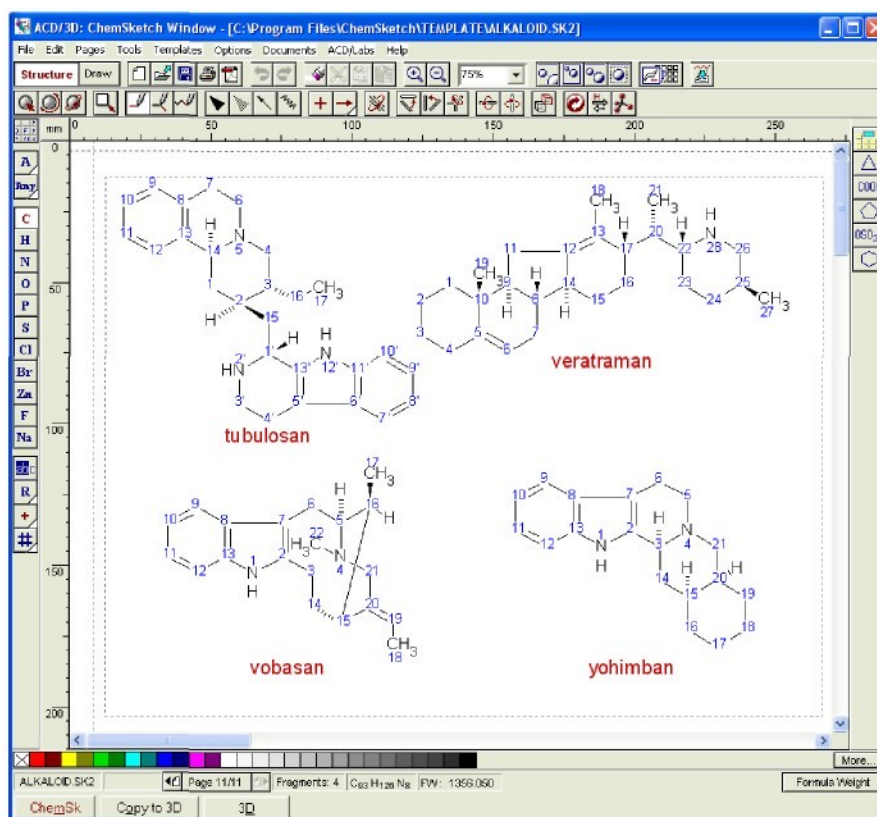
- www.acdlabs.com

Licenční ujednání

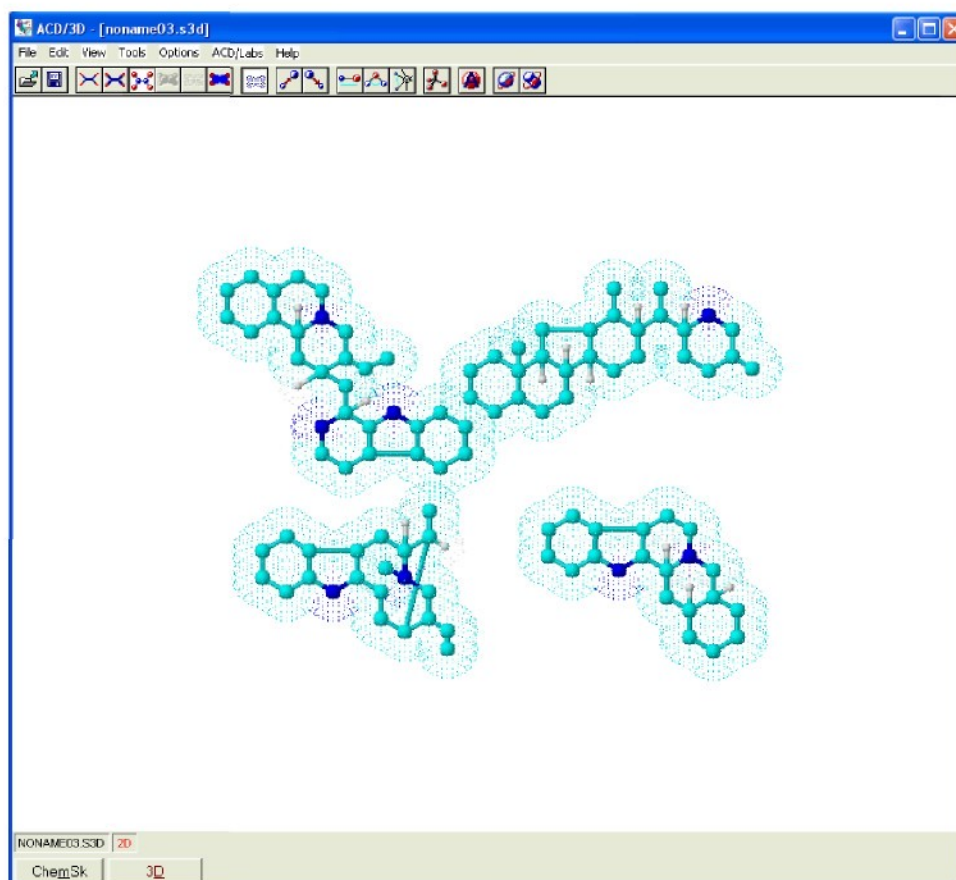
- Freeware verze – pro osobní či akademické využití

Jazyková verze

- anglická
- manuál v českém jazyce



3.35 Ukázka z programu ACD/ChemSketch



3.36 Ukázka z programu ACD/ChemSketch z nástavby ACD/3D Viewer

3.3.2 ViewerLite 5,0

Stručný popis

- nelze provádět optimalizace struktur
- umožňuje export a import různých typů souborů z široké škály programů

Zdroj získání

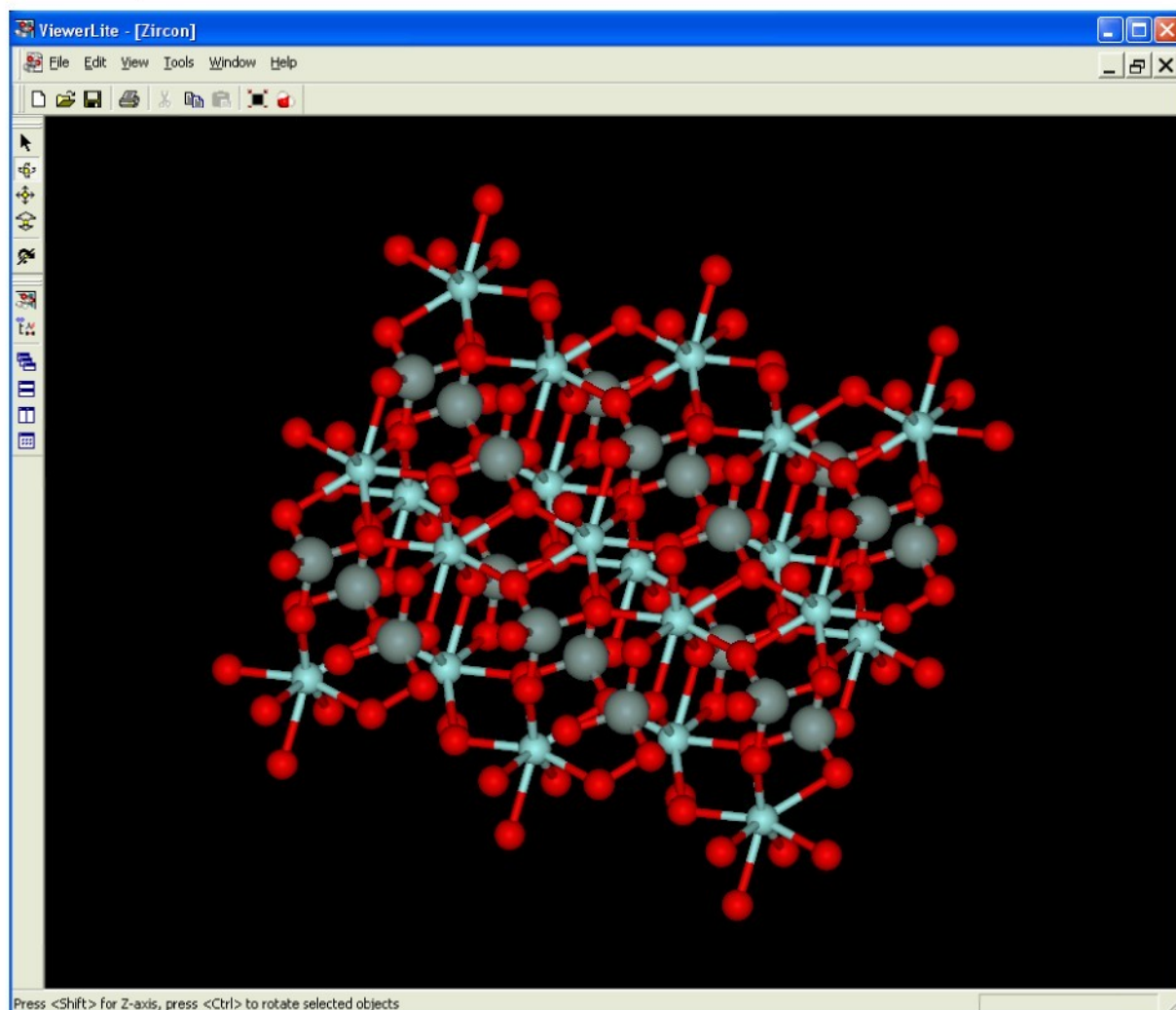
- http://www.accelrys.com/dstudio/ds_viewer

Licenční ujednání

- Freeware verze (plná verze poměrně drahá)

Jazyková verze

- anglická



3.37 Ukázka z programu ViewerLite

3.3.3 Mercury 1,4

Stručný popis

- vhodný pro otáčení struktur o přesně 90°
- umožňuje export a import struktur

Zdroj získání

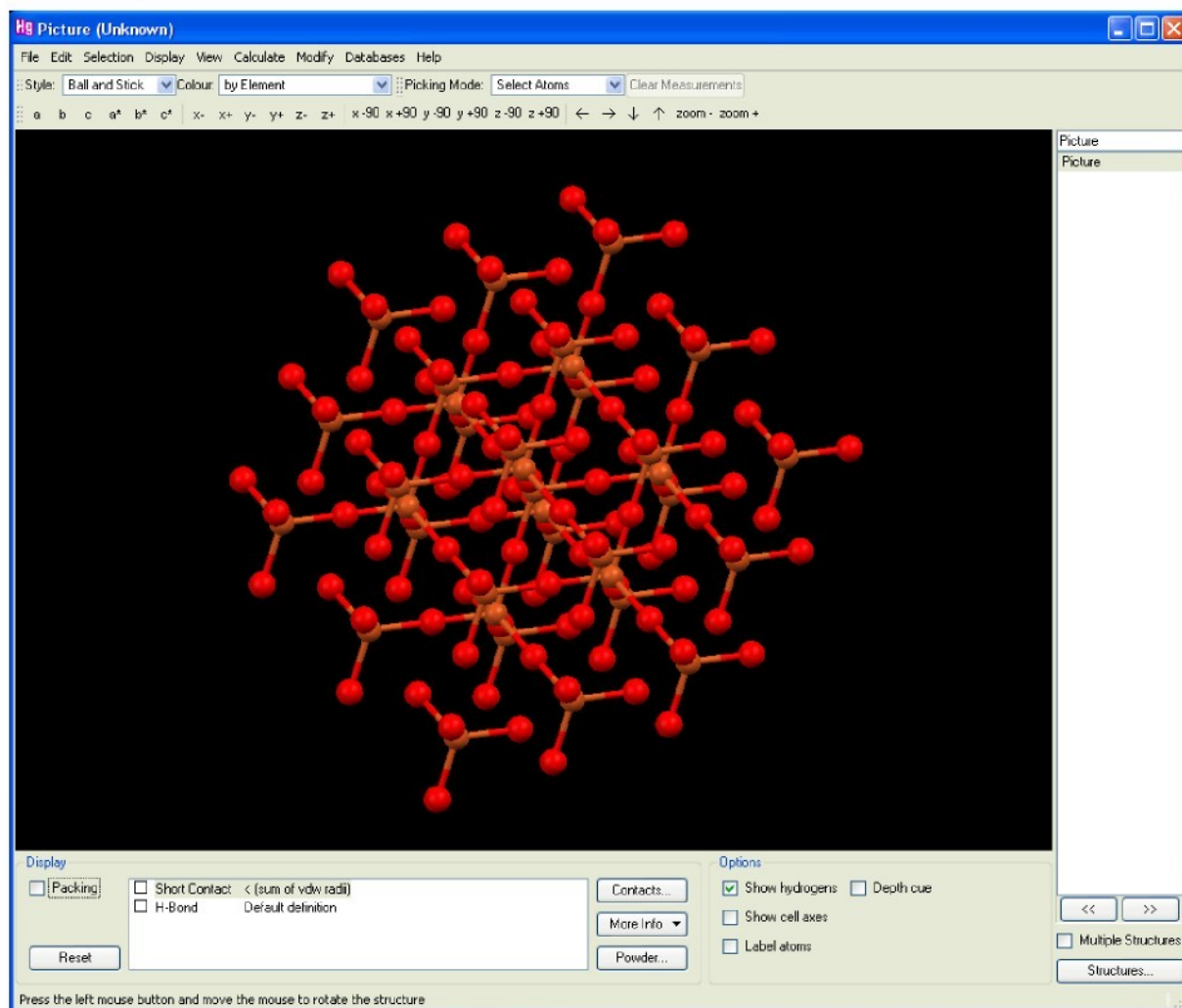
- http://www.ccdc.cam.ac.uk/products/csd_system/mercury/downloads/download.php4

Licenční ujednání

- Freeware verze

Jazyková verze

- anglická

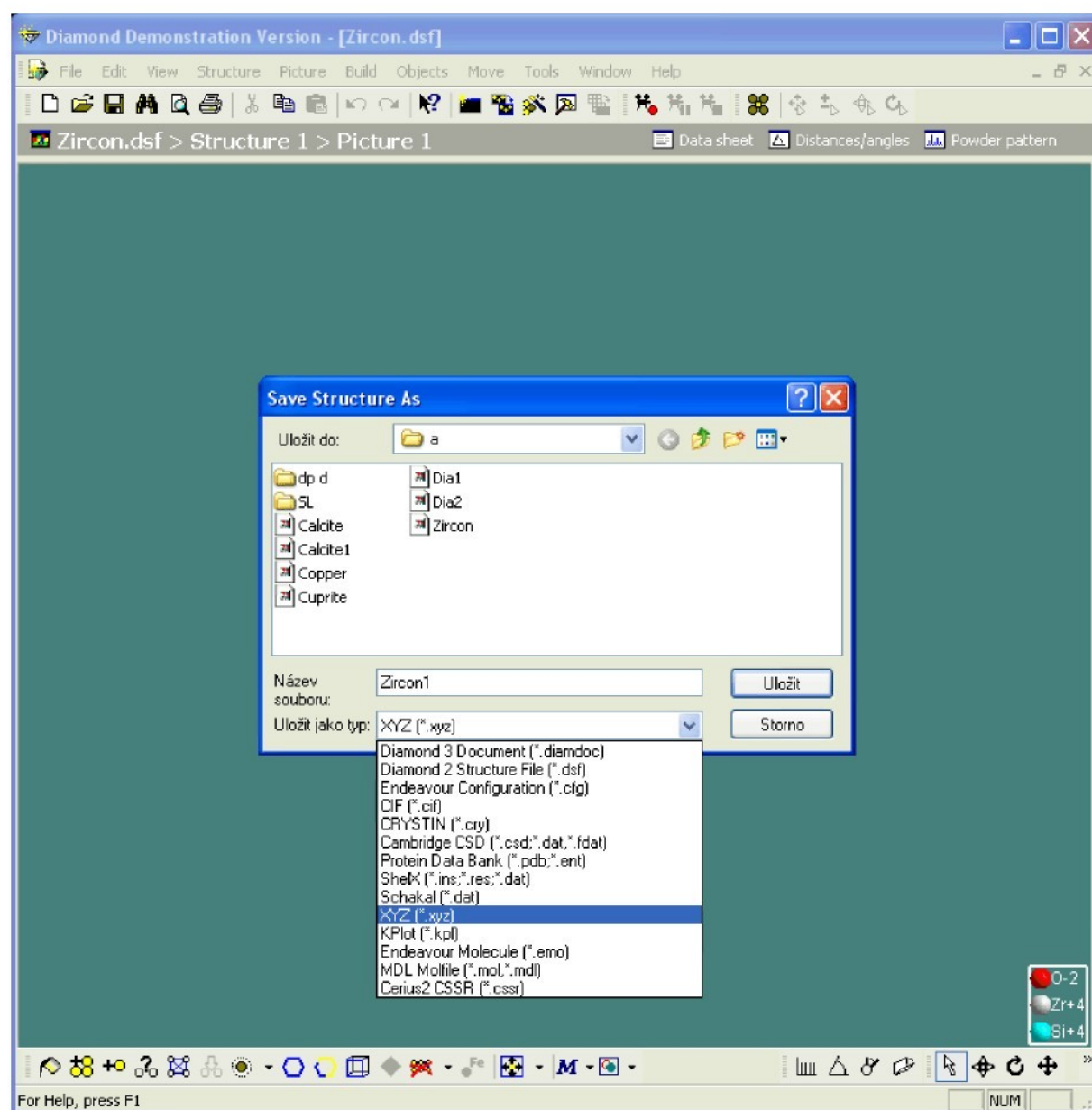


3.38 Ukázka z programu Mercury 1,4

3.4 Export dat do jiných vizualizačních programů

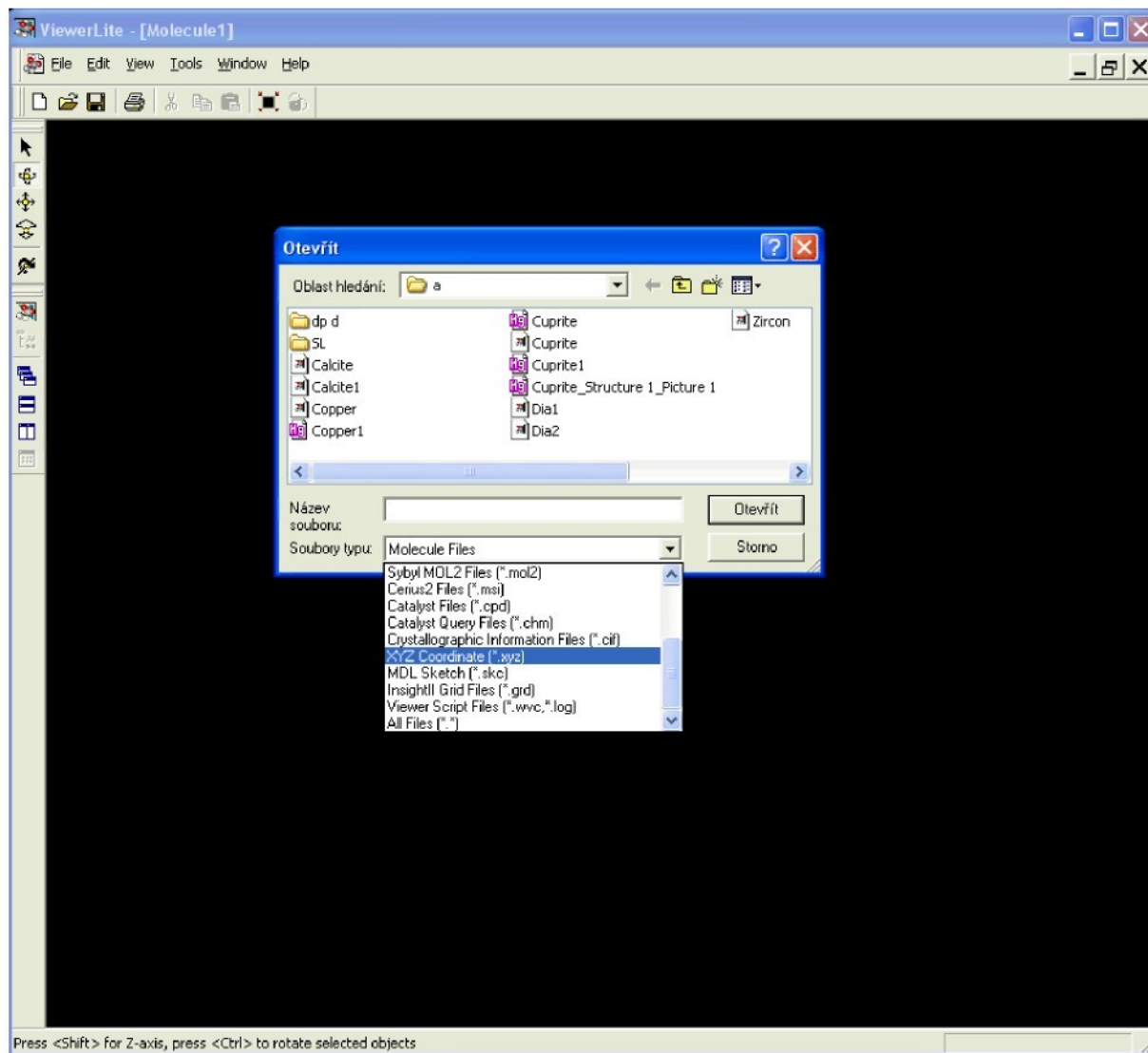
3.4.1 Přenos dat z programu Diamond do programu ViewerLite

Vytvoříme požadovanou strukturu v programu Diamond. Z nabídky *File*, vybereme *Save As* – *Save structure As*. V dialogovém okně v kolonce *Uložit do* vybereme adresář, kam chceme strukturu uložit a zadáme název souboru. V záložce *Uložit jako typ* vybereme formát souboru **.xyz* a uložíme strukturu ve formátu xyz.



3.39. Transformace struktury do formátu *.xyz

V programu ViewerLite z nabídky *File*, vybereme *Open* a v dialogovém okně změníme v záložce *Soubor typu* formát souboru na *.xyz, najdeme námi uloženou strukturu v tomto formátu z programu Diamond a po otevření s ní můžeme začít pracovat.



3.40. Otevření struktury ve formátu *.xyz v programu ViewerLite

3.4.2 Přenos dat z programu Diamond do programu Mercury

Postup přenosu dat z programu Diamond do programu Mercury je analogický jako v kapitole 3.4.1 s tím rozdílem, že v programu Diamond v kolonce *Uložit jako typ* vybereme formát souboru *.*mol*. V programu Mercury zadáme oblast hledání a název struktury ve formátu opět *.*mol*.

3.5 Výstupy z chemických vizualizačních programů

Z hlediska žáků se jedná o pasivní využívání výstupů jako učební pomůcky.

3.5.1 Výstupy vyžadující didaktickou techniku:

Fólie – vyžadují použití zpětného projektoru, který je klasickým vybavením většiny škol.

Nevýhodou jsou málo syté barvy a nemožnost úprav čehokoli na fóliích po vytištění.

Multimediální prezentace – nejčastěji pomocí Microsoft Power Point, vyžadují použití dataprojektoru. Prezentaci lze snadno upravovat a lze do ní vložit velké množství obrázků nebo videoprojekcí. Nevýhodou je, že dataprojektor není klasickou součástí chemických učeben.

3.5.2 Výstupy nevyžadující didaktickou techniku:

Papírový dokument – je k dispozici pro každého žáka, tedy ve více kopiích. Je lehce připravitelný a finančně nenáročný na výrobu. Nevýhodou je horší komunikace s žáky při používání tohoto dokumentu. Nelze je hromadně upozornit, kam se mají dívat, na co se mají přesně zaměřit.

Plakát – plakát lze vytisknout z klasické tiskárny na velikost A4. Je nenáročný jak na finance, tak na vybavení. Formát A3, který je přehlednější, je možno nechat vytisknout v každém kopírovacím centru. Nevýhodou je, že kvalita plakátu závisí na kvalitě tiskárny. Čím kvalitnější tiskárna, tím větší sytost a výraznost barev.

Internetová prezentace – přináší možnost spuštění celé či části prezentace, vytvořené pro www stránky přímo ve výuce, jako například doplněk výkladu. Tato prezentace vyžaduje také dataprojektor jako prostředek pro její zviditelnění. Nevýhodou je náročnost tvorby prezentace z hlediska počítačového zpracování dokumentů do formy vhodné pro internetovou prezentaci. Také dataprojektor je drahé zařízení, které není na každé škole. Výhodou je zachování sytosti barev a prostorového znázornění chemických struktur.

4. ZÁVĚR

Počítače, internet a v poslední době také interaktivní tabule dávají dnešním pedagogům řadu možností, jak prezentovat názorně a atraktivně chemii a předměty jejího zájmu, ať už jde o molekuly, chemické reakce nebo chemické jevy a zákonitosti. A přestože učitelé mají v dnešní době řadu pomůcek ve formě interaktivních učebnic a objektů, které si mohou pohodlně najít na internetu, patrně se stejně neobejdou bez nějakého vhodného kreslicího programu. V něm si totiž mohou zmíněné objekty upravovat a vytvářet tak, aby splňovaly jejich představy.

Tato práce se zaměřila na výuku chemie, konkrétně na program pro vizualizaci chemické struktury minerálů. Díky své snadné dostupnosti a relativní jednoduchosti byl vybrán k podrobnému popisu program Diamond. Popis obsahuje postup jak a za jakých podmínek lze program získat, přehled základních funkcí programu a návod pro vytváření minerálních struktur.

Dále tato práce nabízí základní informace o minerálech, přehled dalších software pro vizualizaci chemických struktur, návrhy výstupů z programu Diamond a strukturní listy několika minerálů.

V příloze na CD je uloženo 25 strukturních listů minerálů v programu PowerPoint, které je možno vytisknout a použít ve výuce. Dále jsou zde dva soubory s obrázky struktur minerálů ve formátu *.mol a *.xyz, které je také možné použít do různých programů, sloužících jako pomůcka pro učitele. Zejména by se mohly uplatnit v programu Moodle, což je softwarový balíček pro tvorbu výukových systémů a elektronických kurzů na internetu, je poskytován zdarma a lze do něho vkládat studijní materiály ve formě HTML stránek, souborů ke stažení, animací, strukturovaných přednášek a podobně.

Věřím, že tato práce pomůže některým pedagogům překonat bariéry mezi nimi a technikou a strukturní listy poslouží jako vhodná motivace a obohacení hodin chemie.

5. SEZNAM POUŽITÉ LITERATURY

Knižní odkazy:

- ŘEHOŘ, F.: *Přehled mineralogie a petrografie*. Ostrava: Ostravská univerzita, 1997. ISBN 80-7042-754-X, 59 s.
- CHVÁTAL, M.: *Mineralogie, krystalografie*. Praha: Karolinum, 2002. ISBN 80-7184-998-7, 169 s.
- BAUER, J., TVRZ, F.: *Minerály*. Praha: Artia, 1988. 207 s.
- BÍLEK, M., HELLBERG, J.: *K současnému stavu a vývojovým tendencím výuky chemie ve vybraných zemích EU*. Hradec Králové: Gaudeamus, 2000. ISBN 80-7041-795-1, 156 s.
- MYŠKA, K., OPATRŇÝ, P.: *Modelování ve výuce chemie*. Hradec Králové: Gaudeamus, 2005. ISBN 80-7041-463-4, 177 s.
- BERNARD, J., ROST, R., A KOL.: *Encyklopedický přehled minerálů*. Praha: Academia, 1992. ISBN 80-200-0360-6, 701 s.
- KLIKORKA, J., HÁJEK, B., VOTÍNSKÝ, J.: *Obecná a anorganická chemie*. Praha: SNTL – Nakladatelství technické literatury, 1985. 591 s.
- KRAUS, I.: *Vlastnosti a struktura krystalů*. Praha: Academia, 1993. ISBN 80-200-0372-X, 275 s.

Internetové odkazy:

- <http://www.acdlabs.com>
- http://www.accelrys.com/dstudio/ds_viewer
- http://www.ccdc.cam.ac.uk/products/csd_system/mercury/downloads/download.php4
- <http://www.velebil.net/>
- <http://www.wikipedia.cz>
- <http://www.mineral.cz>
- <http://mineralogie.sci.muni.cz/index.htm>
- <http://www.natur.cuni.cz/ugmnz/mineral/>
- <http://www.webmineral.com/>

6. PŘÍLOHY

Seznam příloh – strukturních listů na CD:

Příloha č. 1 – Anhydrit

Příloha č. 2 – Borax

Příloha č. 3 – Borax

Příloha č. 4 – Brookit

Příloha č. 5 – Cristobalit

Příloha č. 6 – Diamant

Příloha č. 7 – Fluorit

Příloha č. 8 – Grafit

Příloha č. 9 – Halit

Příloha č. 10 – Chalkopyrit

Příloha č. 11 – Ilmenit

Příloha č. 12 – Kalcit

Příloha č. 13 – Korund

Příloha č. 14 – Křemen

Příloha č. 15 – Kuprit

Příloha č. 16 – Mastek

Příloha č. 17 – Měď

Příloha č. 18 – Olivín

Příloha č. 19 – Pyrit

Příloha č. 20 – Rutil

Příloha č. 21 – Sfalerit

Příloha č. 22 – Síra

Příloha č. 23 – Sodalit

Příloha č. 24 – Topaz

Příloha č. 25 - Zirkon

Soubor č.1 – struktury ve formátu *.xyz

Soubor č.2 – struktury ve formátu *.mol