

## Zadání molekuly

Po spuštění se uživatel ocitne na stránce pro brání molekuly ve SMILES formátu, jež zadá do textového pole a program spustí tlačítkem „Pojmenovat“.

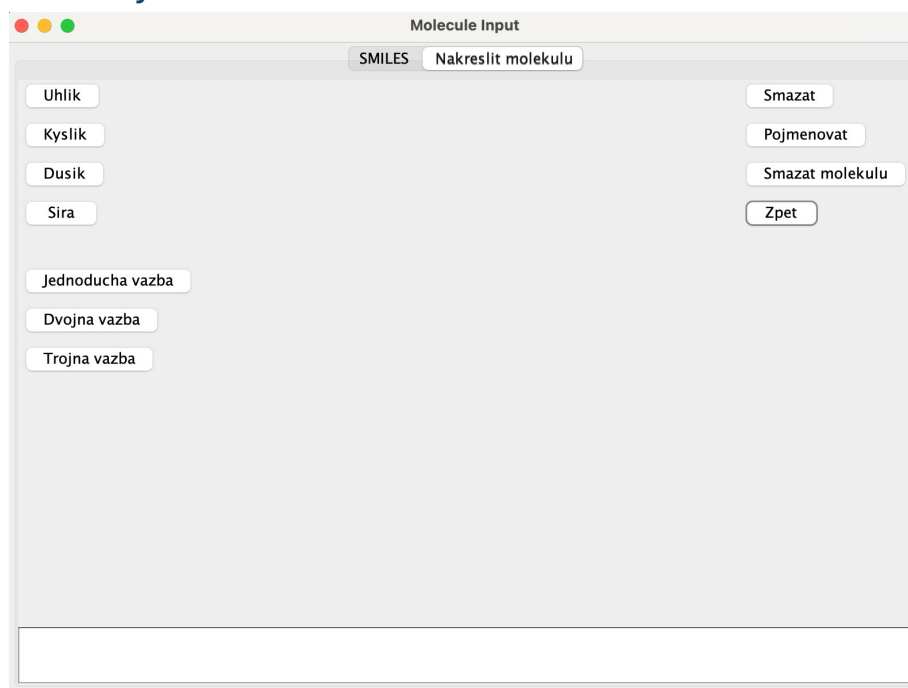


The screenshot shows a window titled "Molecule Input". At the top, there are two tabs: "SMILES" (which is selected) and "Nakreslit molekulu". Below the tabs, the text "Zadejte molekulu ve SMILES formátu:" is followed by a text input field containing the SMILES string CCC1(O)C=CC(CCCO)CC(O)C1. To the right of the input field is a button labeled "Pojmenovat". Below the input field, the text "Jmeno: 7-(ethyl)-4-(propyl-3-ol)-cyklohept-5-en-2,7-diol" is displayed.

Obrázek 1 SMILES panel otevřený po spuštění aplikace

Pro nakreslení molekuly je nutno změnit panel nahoře na „Nakreslit molekulu.“

## Kreslení molekuly



The screenshot shows the same "Molecule Input" window, but the "Nakreslit molekulu" tab is now selected. The interface is divided into two main sections. On the left, there are buttons for adding atoms: "Uhlík", "Kyslík", "Dusík", and "Sír", followed by buttons for adding bonds: "Jednoduchá vazba", "Dvojná vazba", and "Trojná vazba". On the right, there are buttons for editing: "Smazat", "Pojmenovat", "Smazat molekulu", and "Zpet". At the bottom of the window is a large, empty rectangular area for drawing the molecule.

Obrázek 2 Kreslicí panel

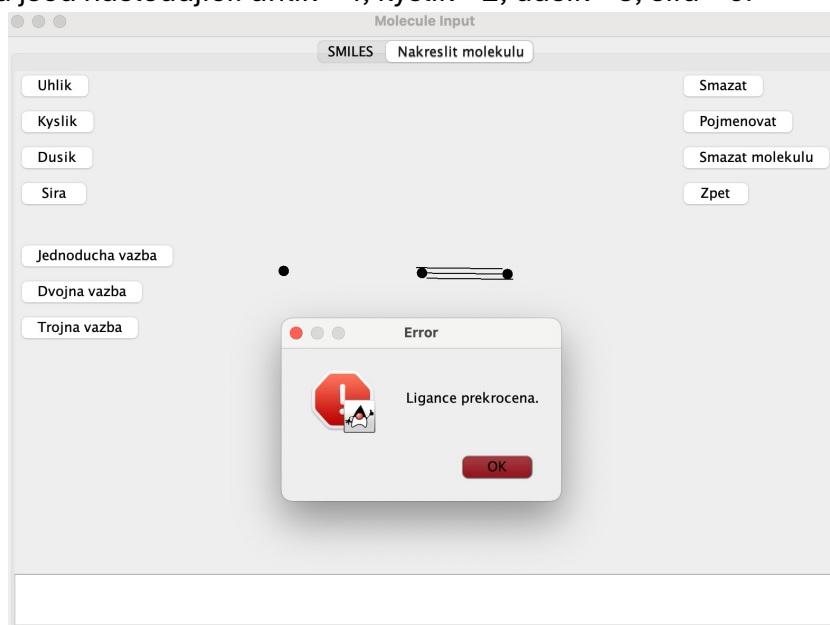
## Kreslení atomu

Defaultní prvek je uhlík, jiný uživatel zvolí z levého sloupce pravým kliknutím na dané tlačítko a zakreslí ho pravým kliknutím do volného prostoru. Pro přehlednost mají prvky různé barvy a to následující: uhlík – černý, kyslík – červený, dusík – modrý, síra – žlutá. Právě zvolený bod je zelený.

## Kreslení hrany

Prvně se klikne na jeden z koncových bodů hrany, který se zabarví zeleně a poté se kliknutím levým tlačítkem myši zvolí druhý bod hrany. Defaultní násobnost hrany je jedna, dvojnou či trojnou uživatel zvolí kliknutím na tlačítko z levého sloupce.

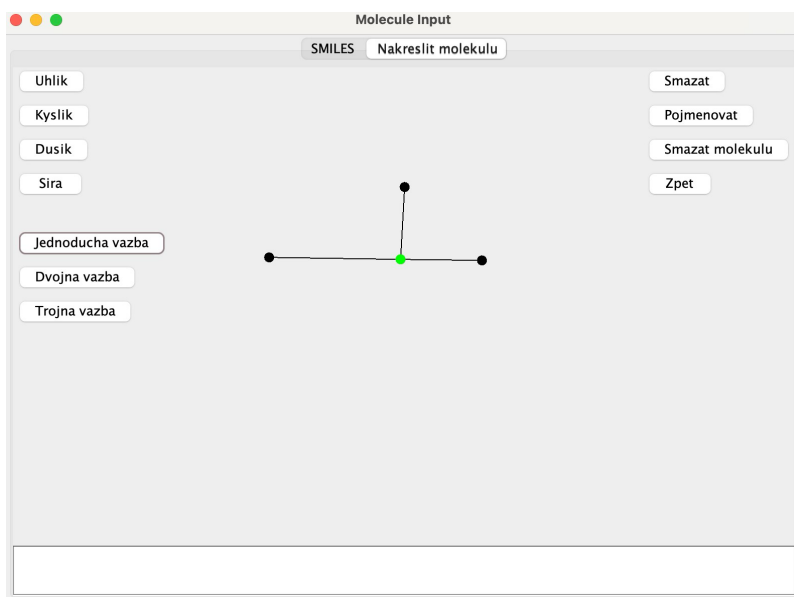
O přesažení vaznosti atomu je uživatel informován chybovou zprávou a hrana se smaže. Vaznosti prvků jsou následující: uhlík – 4, kyslík – 2, dusík – 3, síra – 6.



Obrázek 3 Chybová hláška po přesažení vaznosti uhlíku

## Mazání

Daný bod nebo hrana se vybere pravým stisknutím myši, což uživatel pozná dle zeleného zabarvení, a následným zmáčknutím tlačítka „Smazat“ v pravém sloupci. Smazáním bodu se smažou i všechny hrany, které z něho vycházejí.



Obrázek 4 Zvolený bod ke smazání

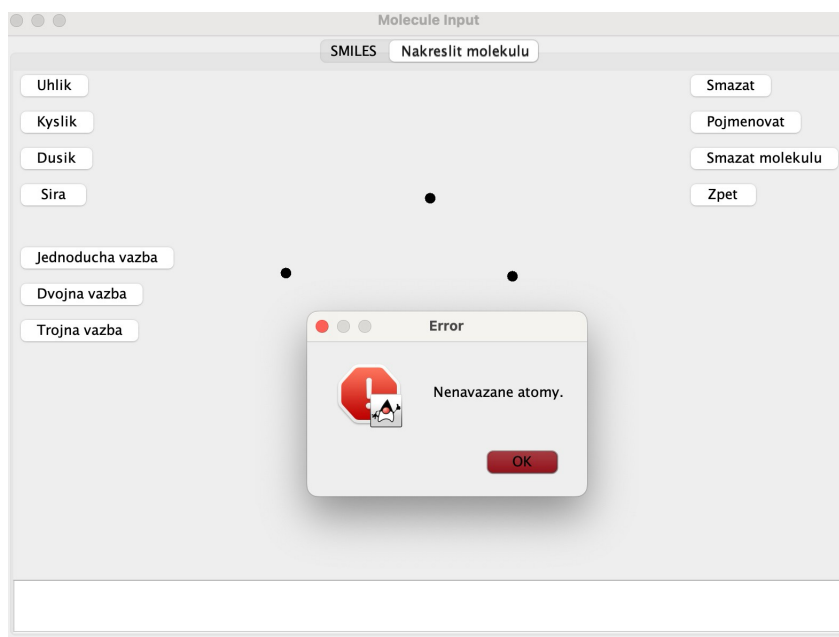


Obrázek 5 Molekula po smazání bodu

Také je možnost smazat celou molekulu, a také odstranit poslední krok tlačítkem „Zpet.“

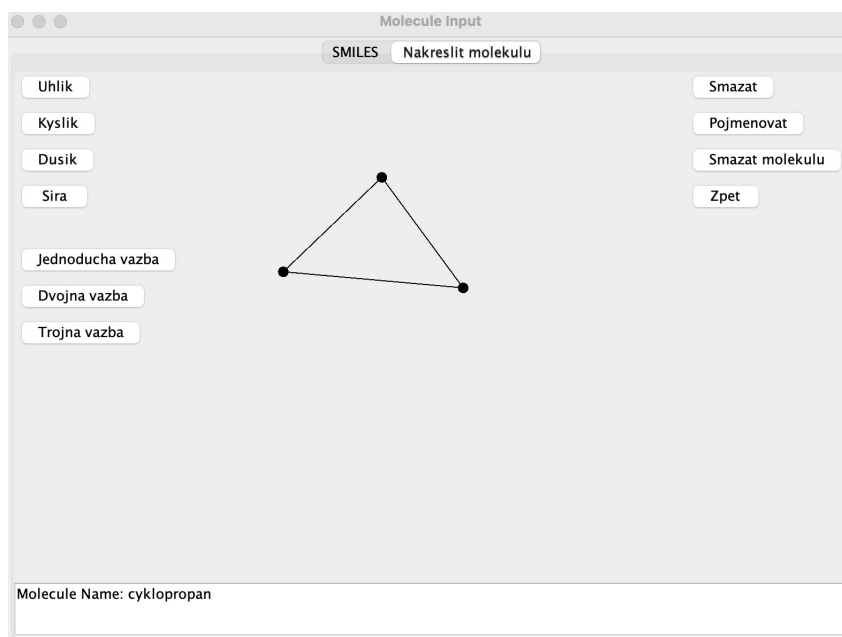
## Pojmenování molekuly

Pro pojmenování je nutné, aby všechny atomy byly spojené do jedné molekuly, v opačném případě je uživatel informován chybovou zprávou.

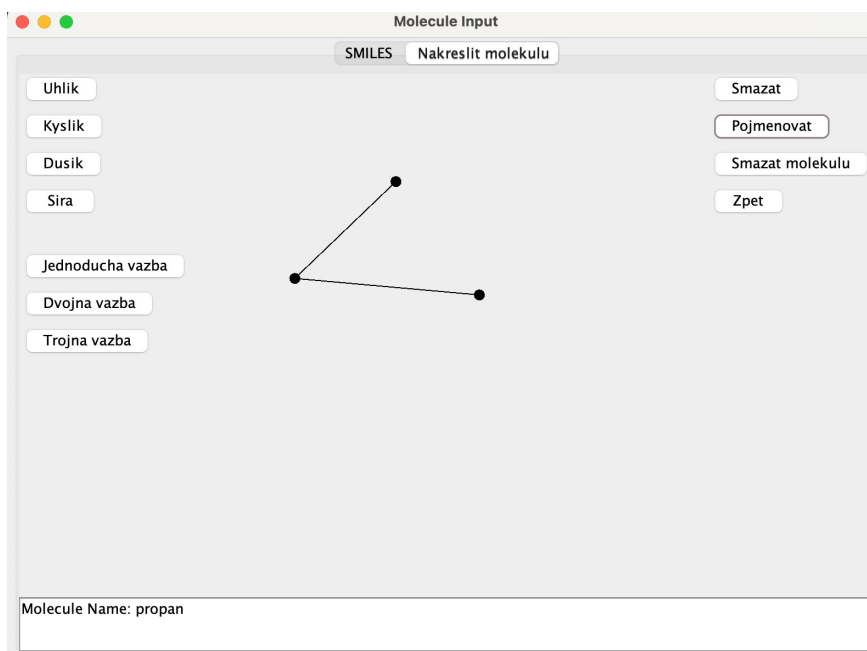


Obrázek 6 Chybová zpráva po pojmenování nespojitě molekuly

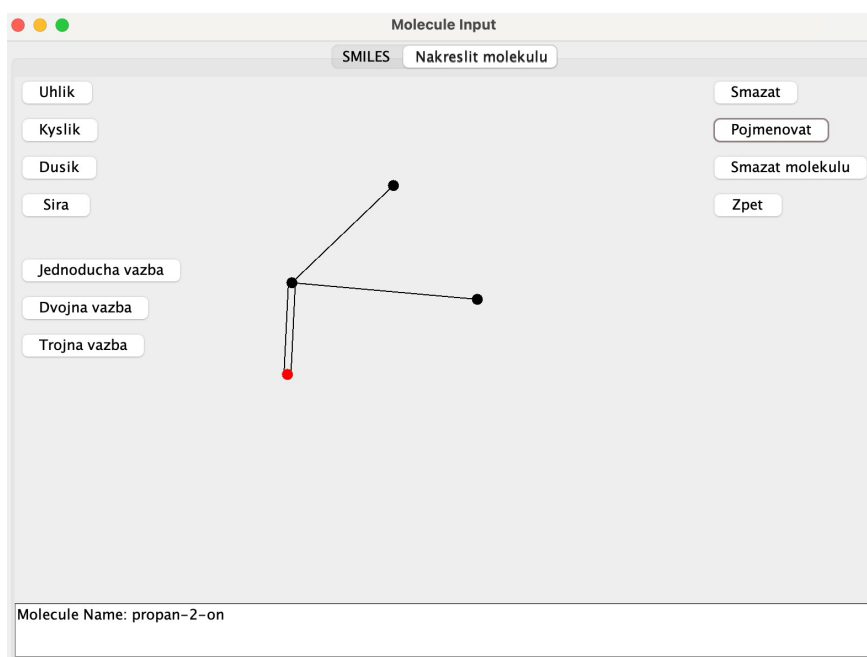
Po pojmenování molekuly je pořád možné ji upravovat.



Obrázek 7 Pojmenovaný cyklopropan



Obrázek 8 Smazaná hrana v molekule, která je nyní propan



Obrázek 9 Přidaná oxoskupina za vzniku ketonu