AEEF

Päivitetty 1.9.2018 MYA

MarvinSketch

Ari Myllyviita FM, yhteisöpedagogi (AMK)
ari.myllyviita@helsinki.fi
Kemian ja matematiikan lehtori
Helsingin yliopiston Viikin normaalikoulu

AEEF

bit.ly/marvinsketch

Sisältö

1. …
2. …
3. …
4. Ohjeet
5. Ohjelman käyttö

AEEF

MarvinSketch – ohjelman käyttö

ABITTI-TIKUSSA MARVINSKETCH 17.3.27

LADATTAVISSA 18.21.0 (17.29.0 17-SARJAN VIIMEINEN)

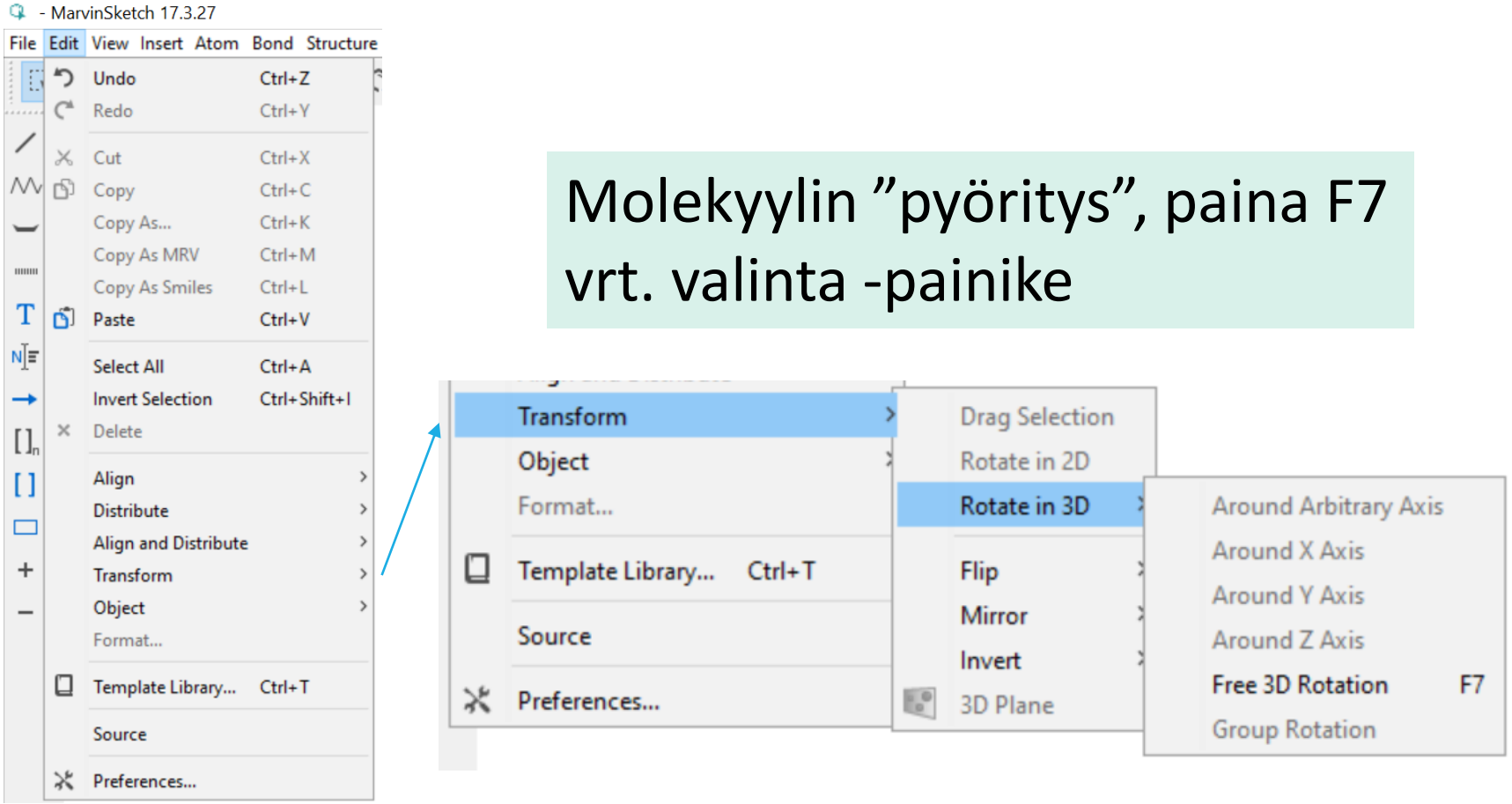
AEEF

Mihin MarvinSketch ”taipuu”

- Molekyylien piirtäminen 2D – 3D
- Reaktioyhtälöiden kirjoittaminen (orgaaninen kemia)

AEEF

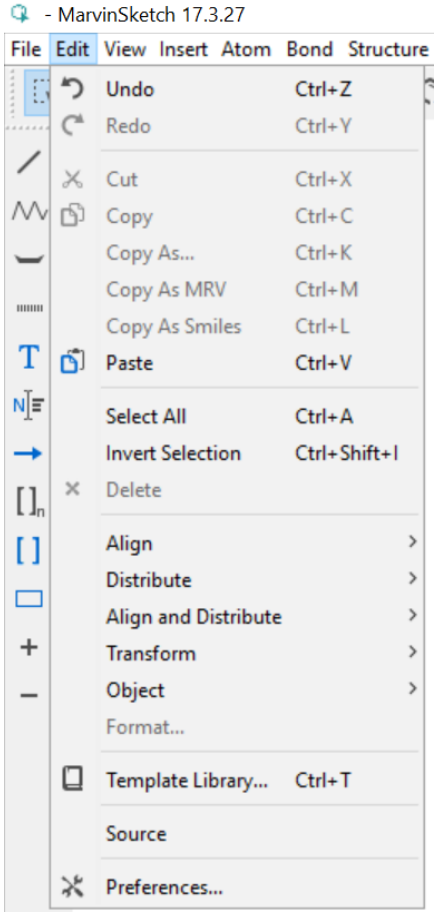
Valikot - **Edit**

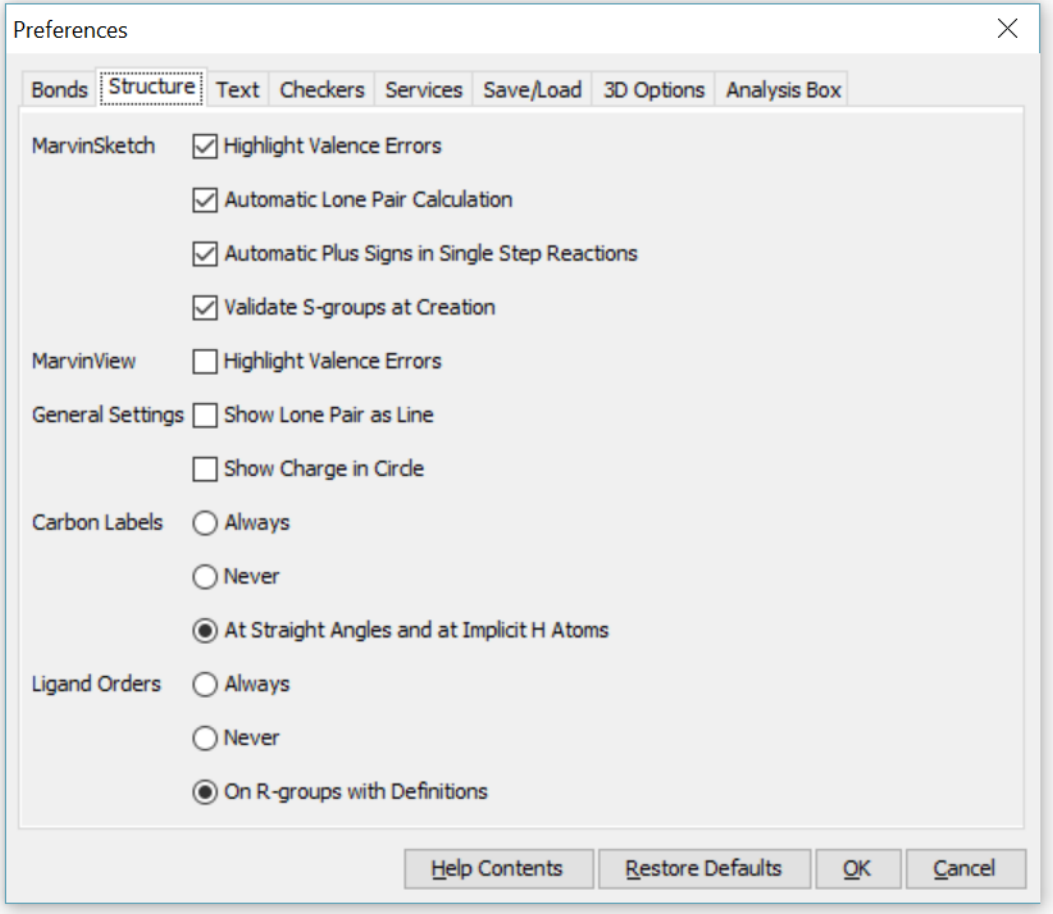


Molekyylin ”pyöritys”, paina F7 vrt. valinta -painike

AEEF

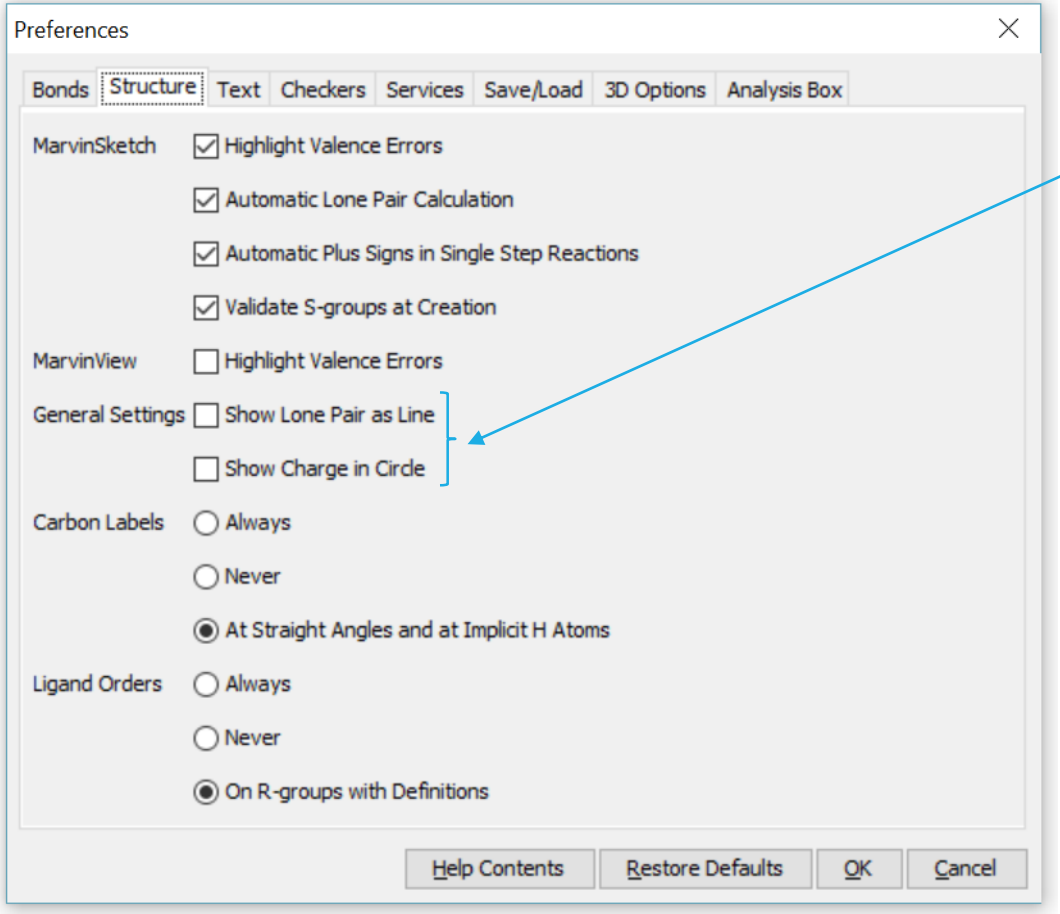
Valikot – Edit – **Preferences…**





AEEF

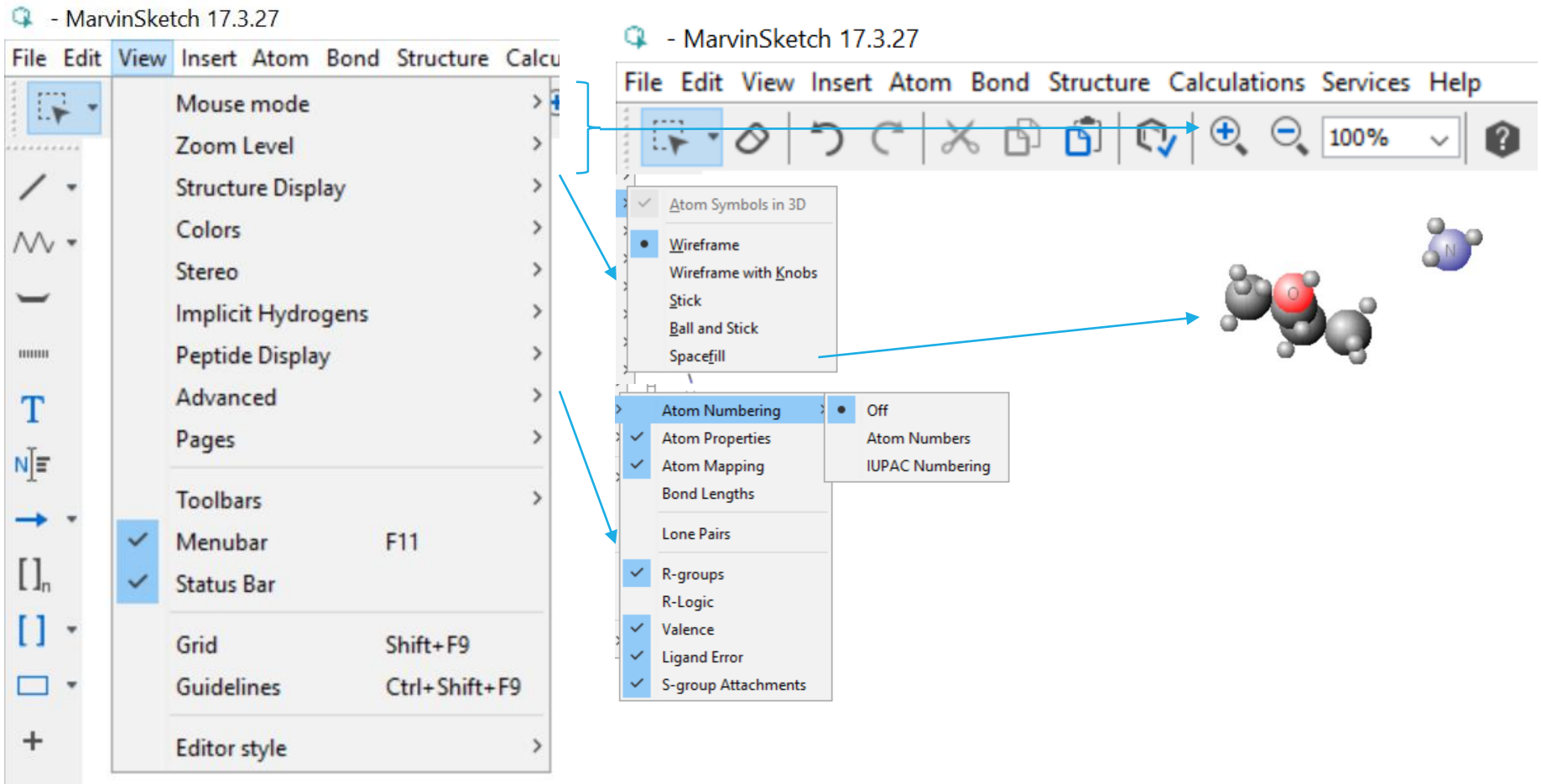
Vapaat elektroniparit näkyviin



EI TOIMI NORMIOHJELMALLA?

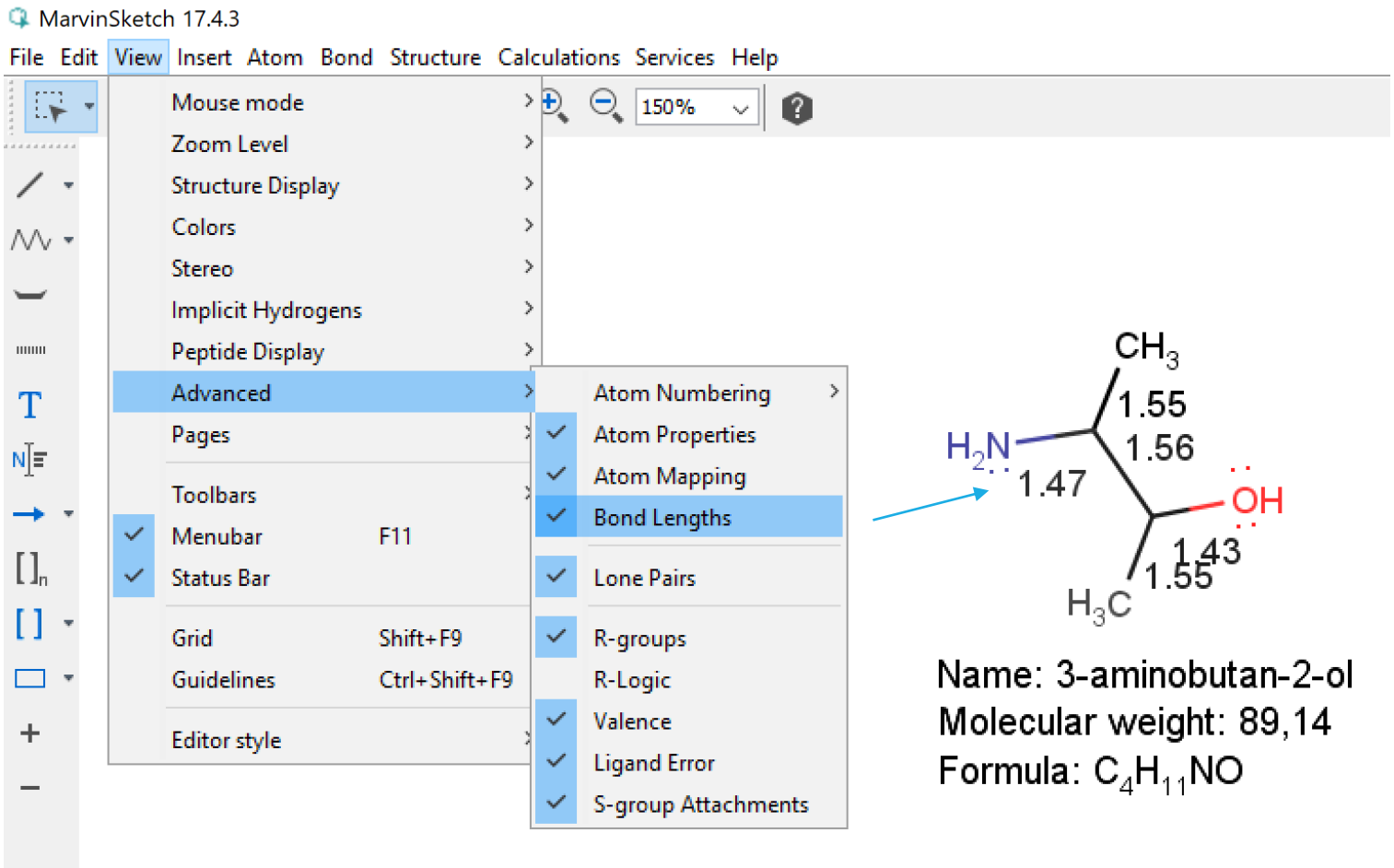
AEEF

Valikot - **View**



AEEF

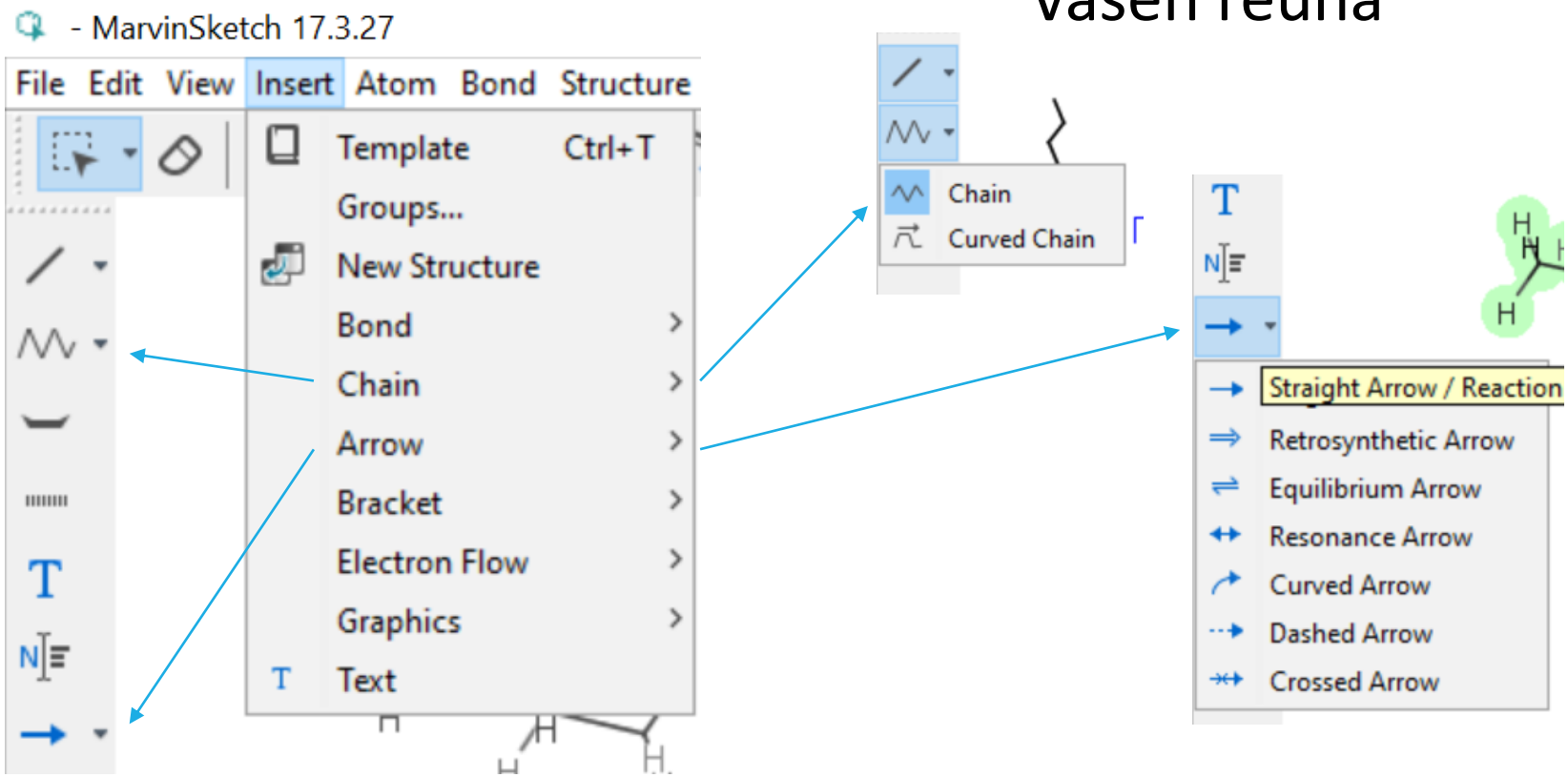
Valikot – View – Bond Length



AEEF

Valikot - **Insert**

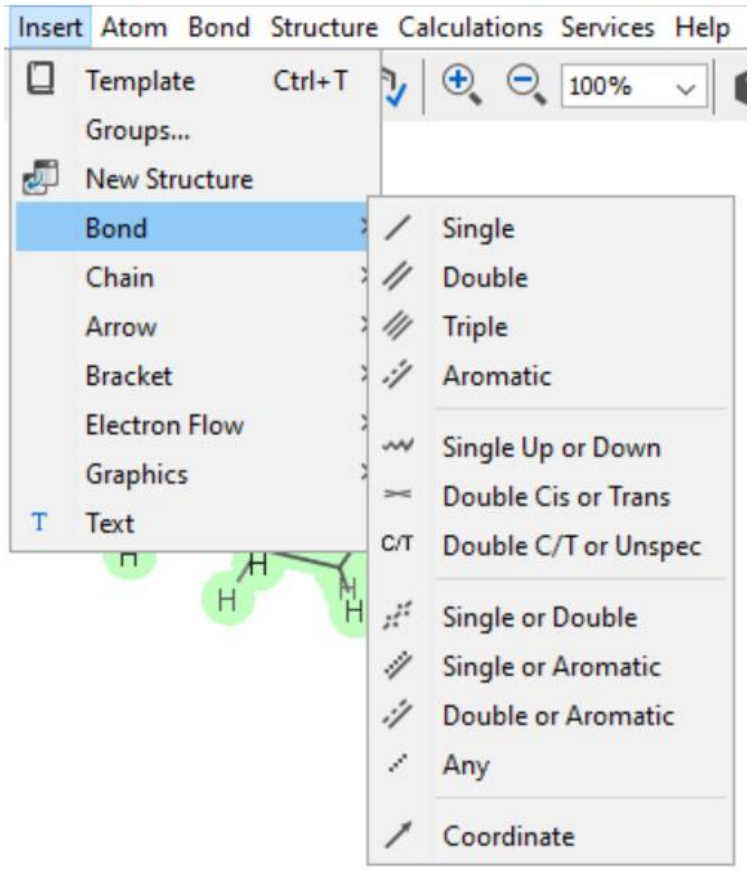
Vasen reuna



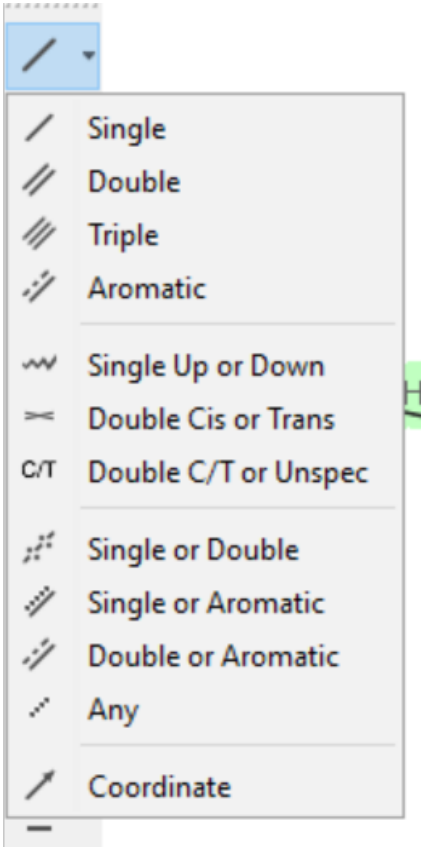
AEEF

Bond - Pikavalikosta

tch 17.3.27

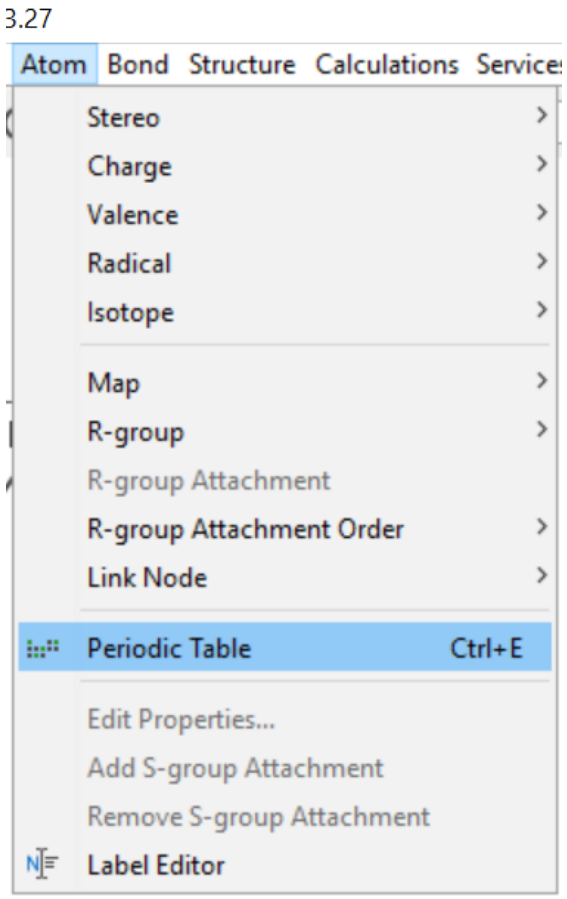


Vasen reuna



AEEF

Valikot - **Atom**

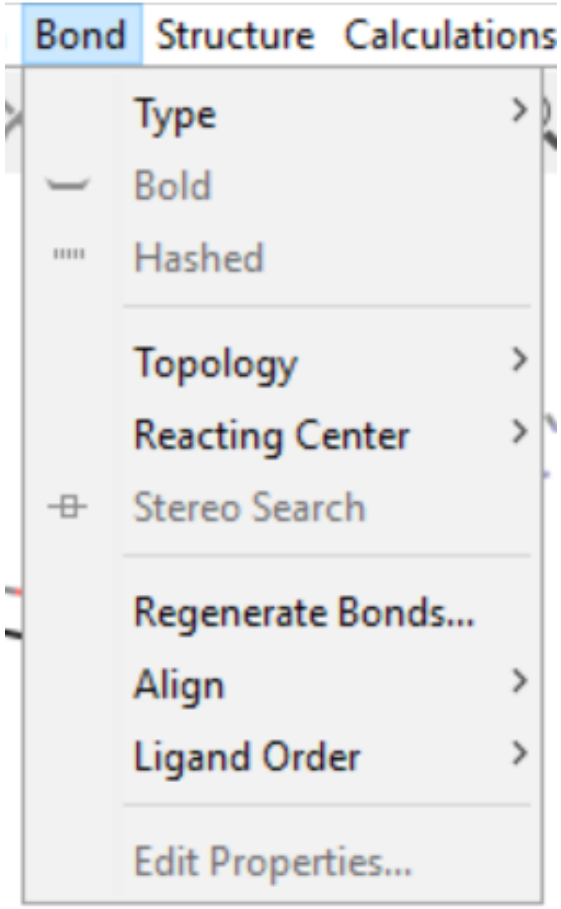


Oikea reuna

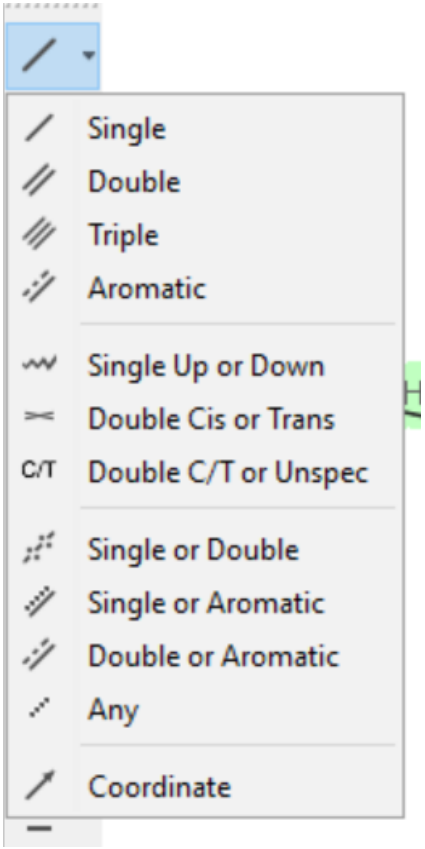
Valitse alkuaine

AEEF

Valikot - **Bond**

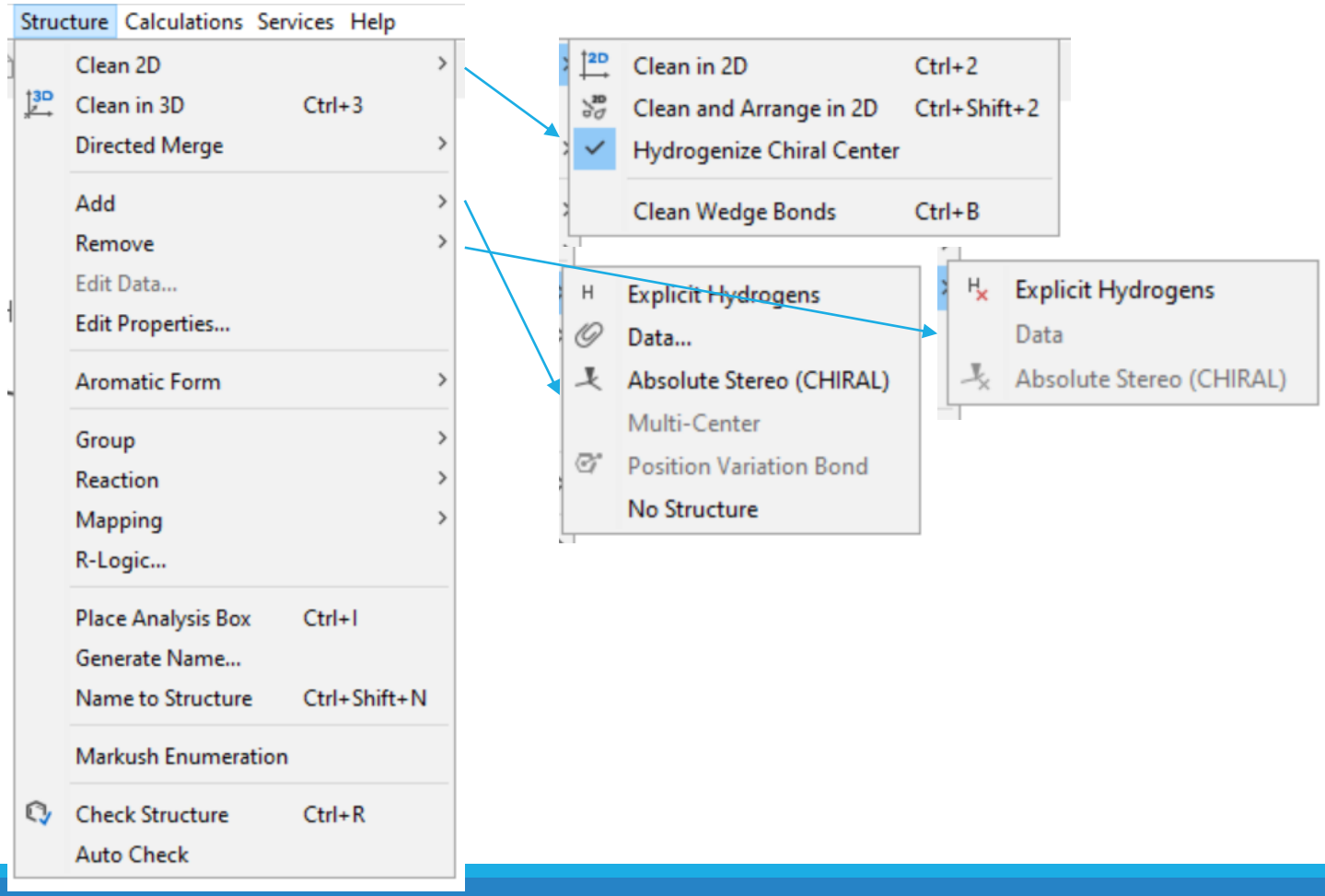


Vasen reuna



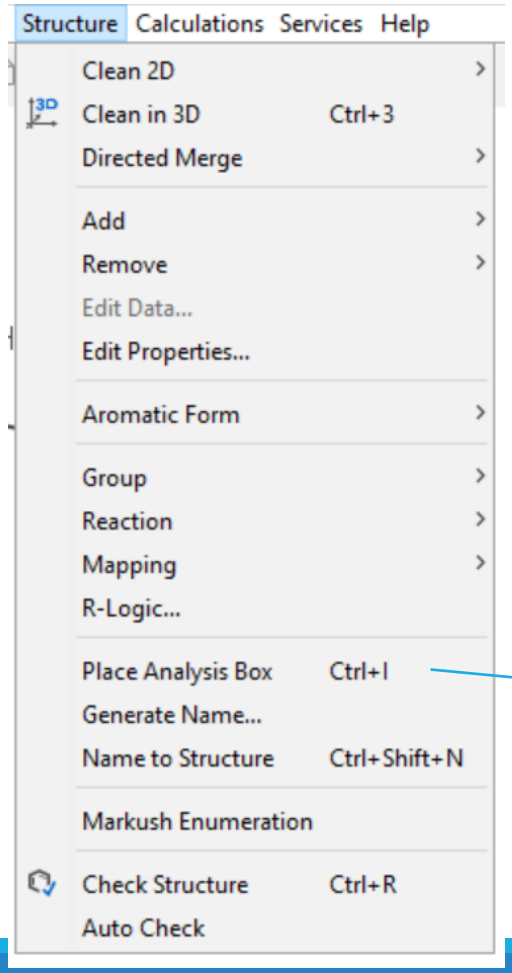
AEEF

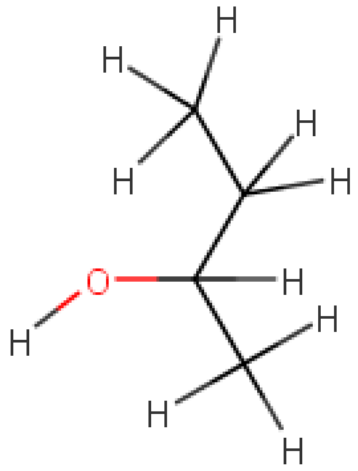
Valikot – **Structure**



AEEF

Valikot – **Structure**

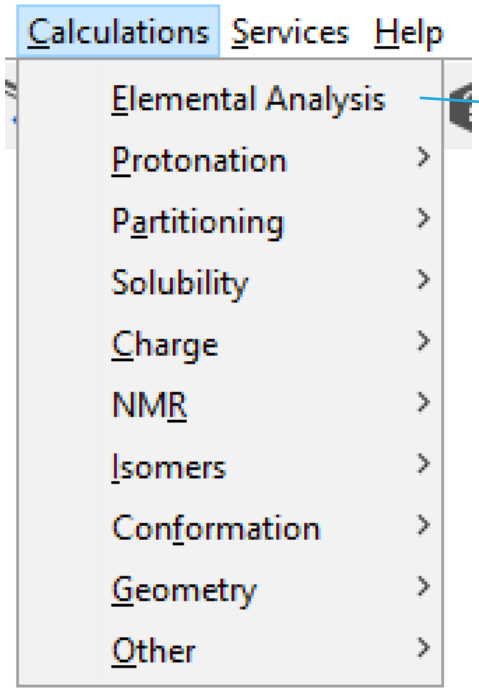


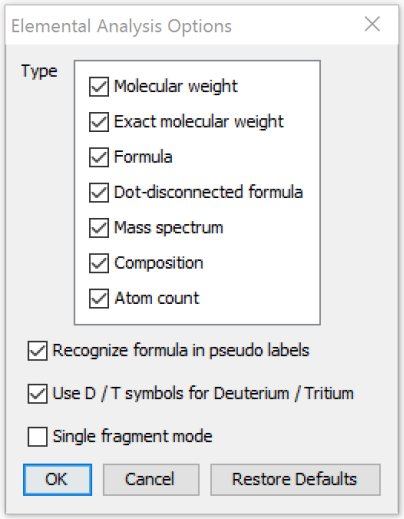


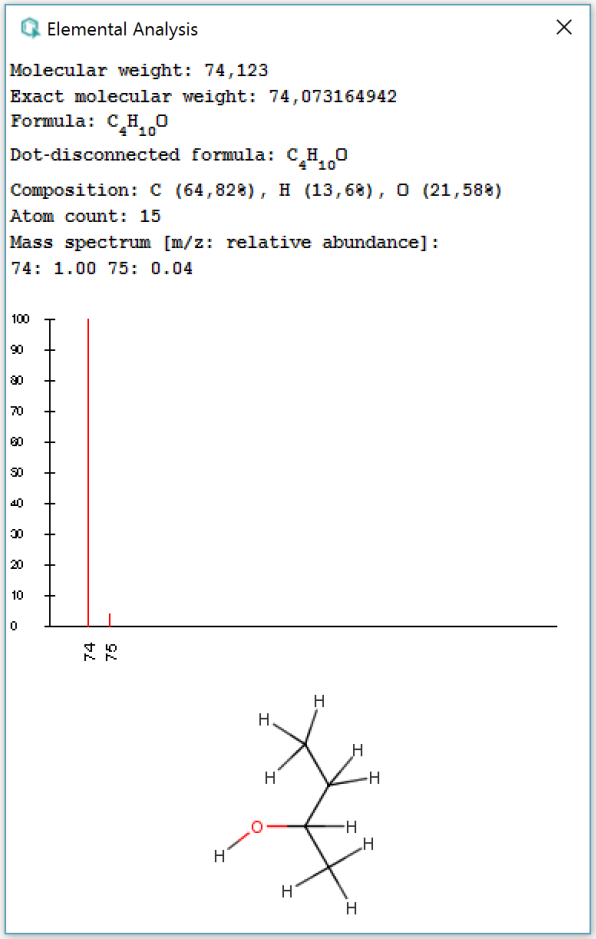
Name: butan-2-ol
Molecular weight: 74,12
Formula: $C_4H_{10}O$

AEEF

Valikot – Calculations

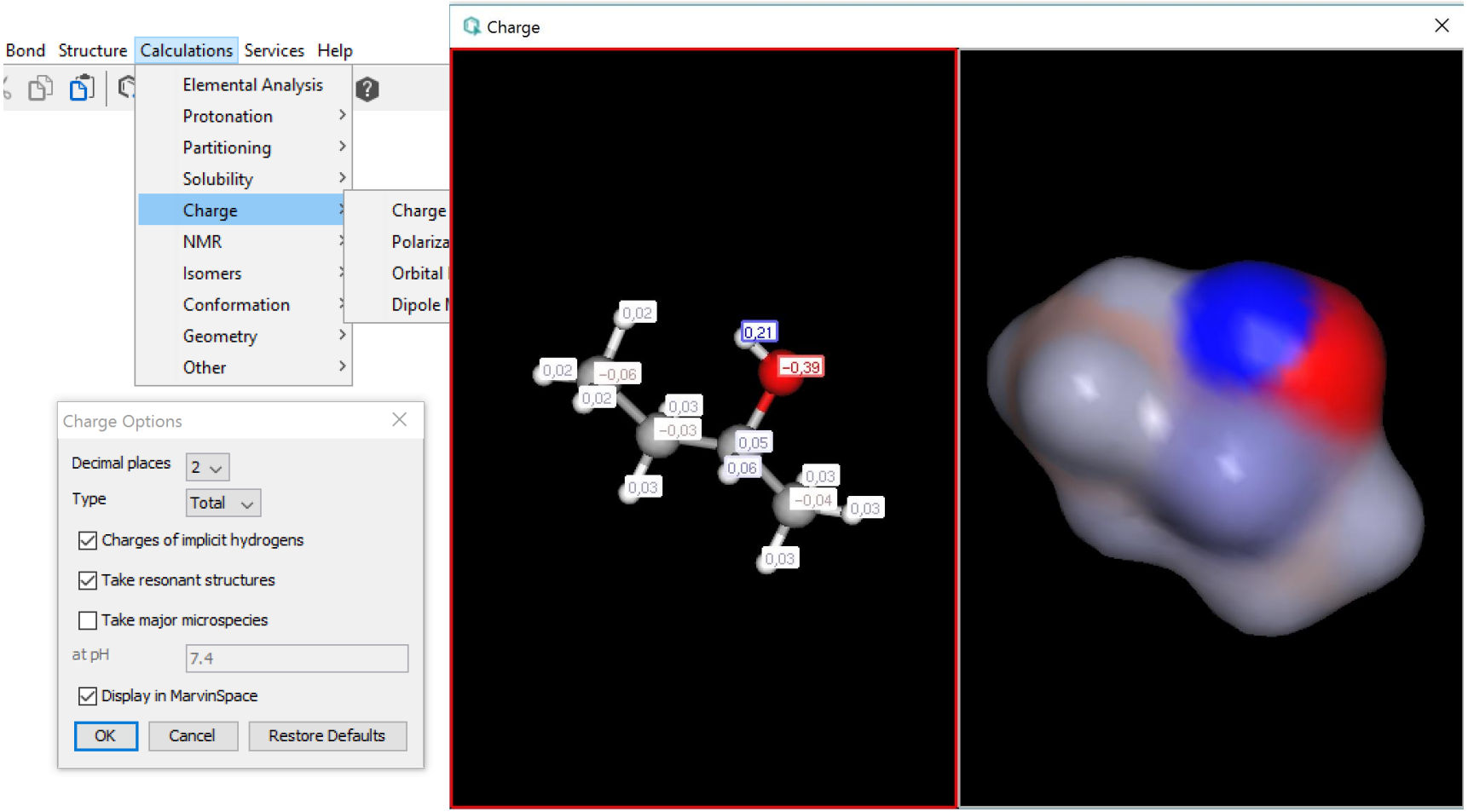






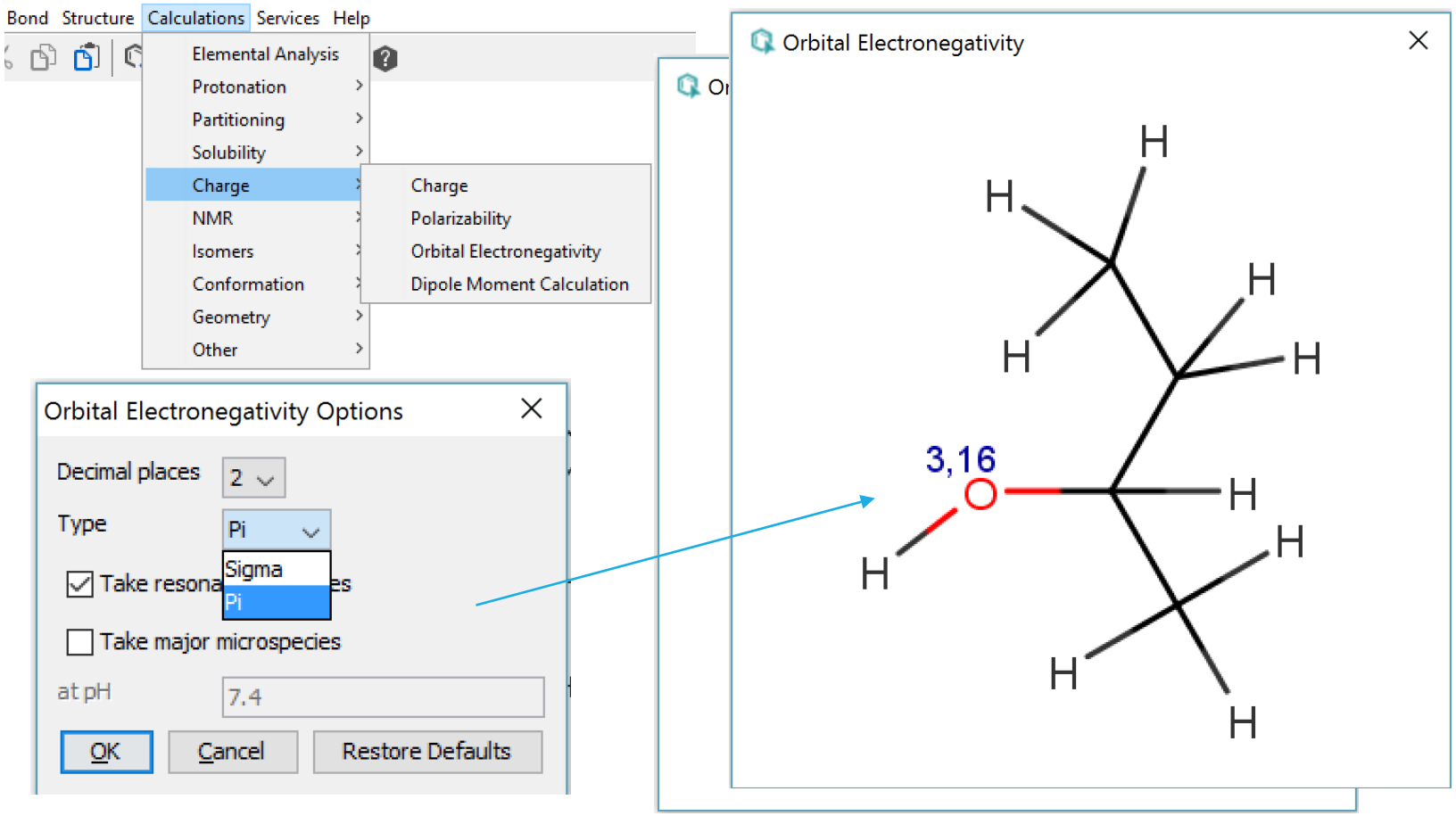
AEEF

Valikot – Calculations - **Charge**



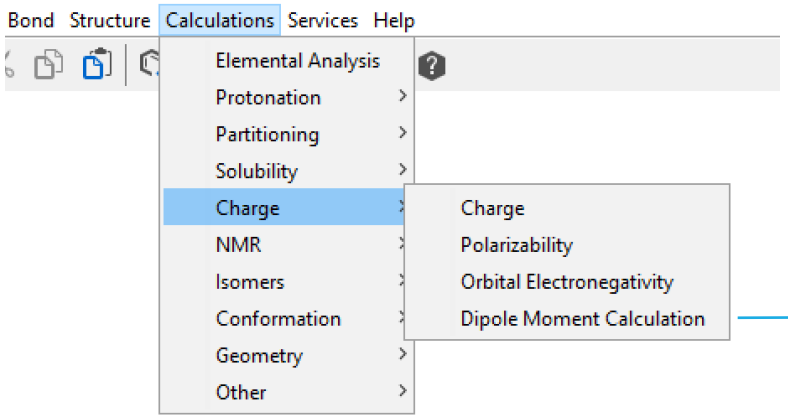
AEEF

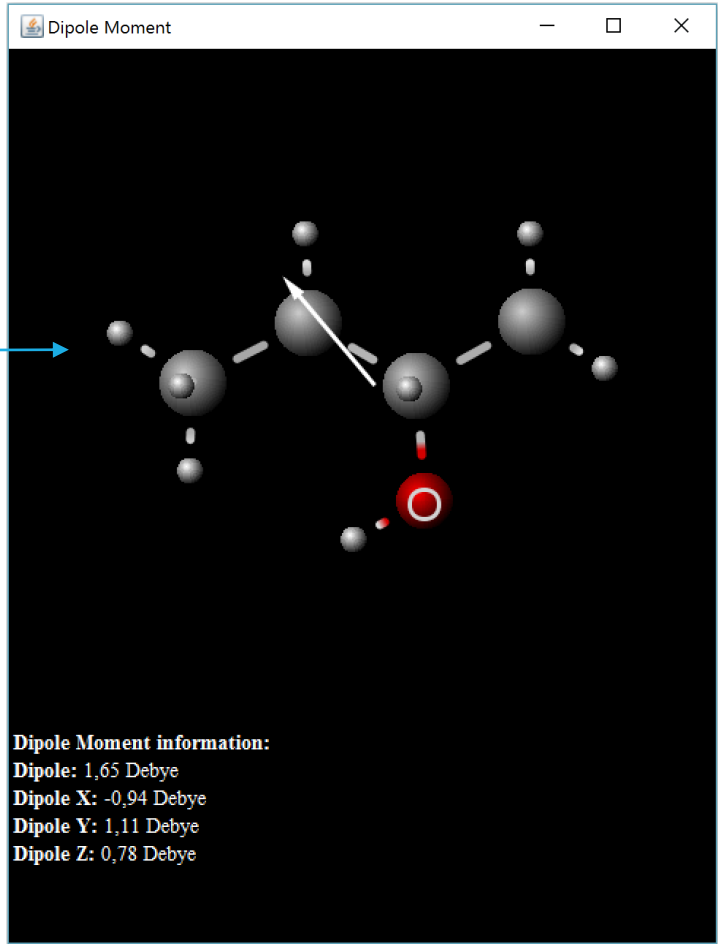
Valikot – Calculations - **Charge**



AEEF

Valikot – Calculations - **Charge**

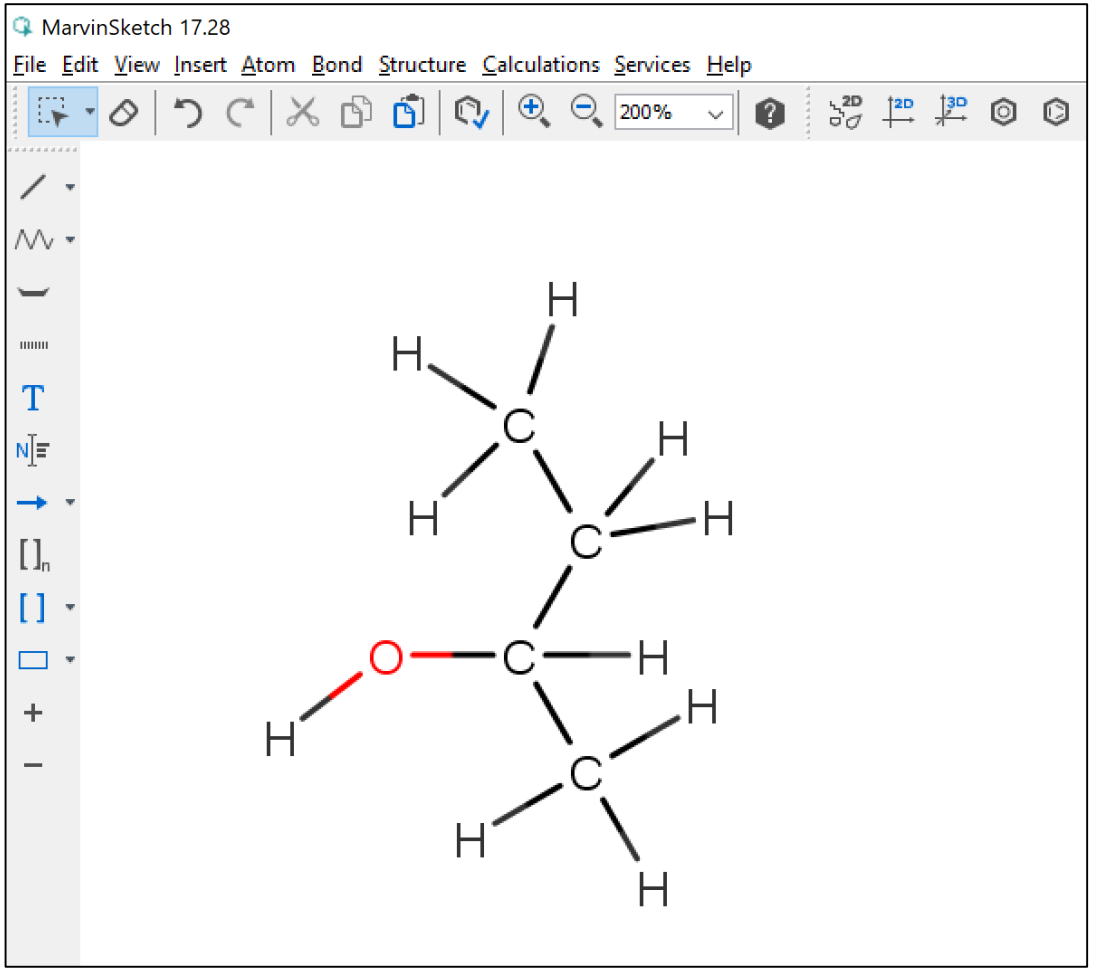




MarvinSketch

Pedagogisia valintoja?

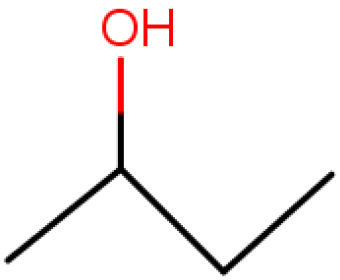
1. Viivakaava vai täydellinen rakennekaava?



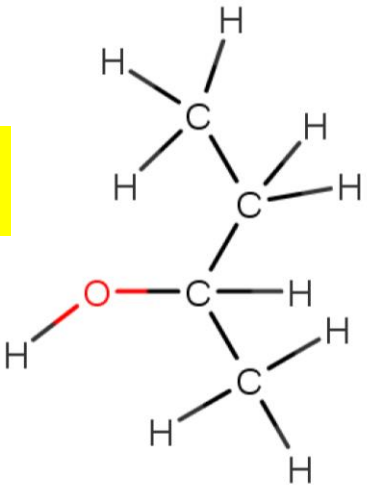
Joko viivakaava tai täydellinen rakennekaava?

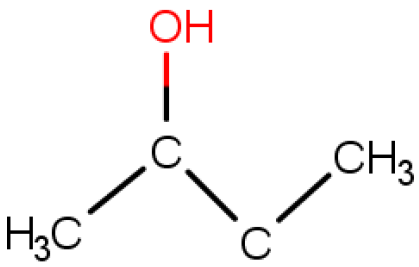
Joko viivakaava tai täydellinen rakennekaava

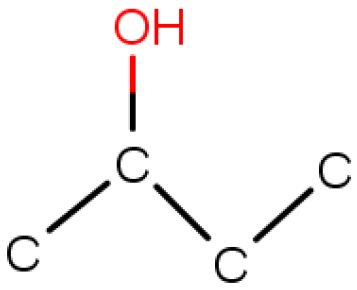
JOKO

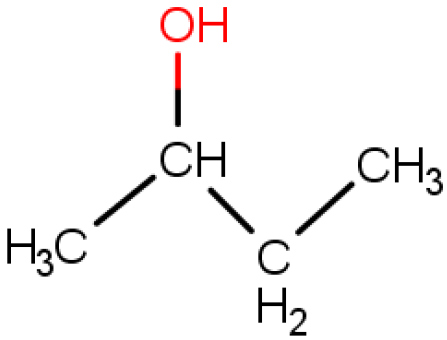


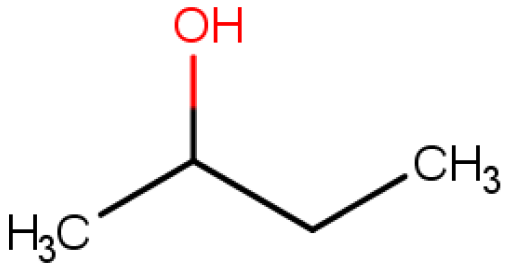
TAI









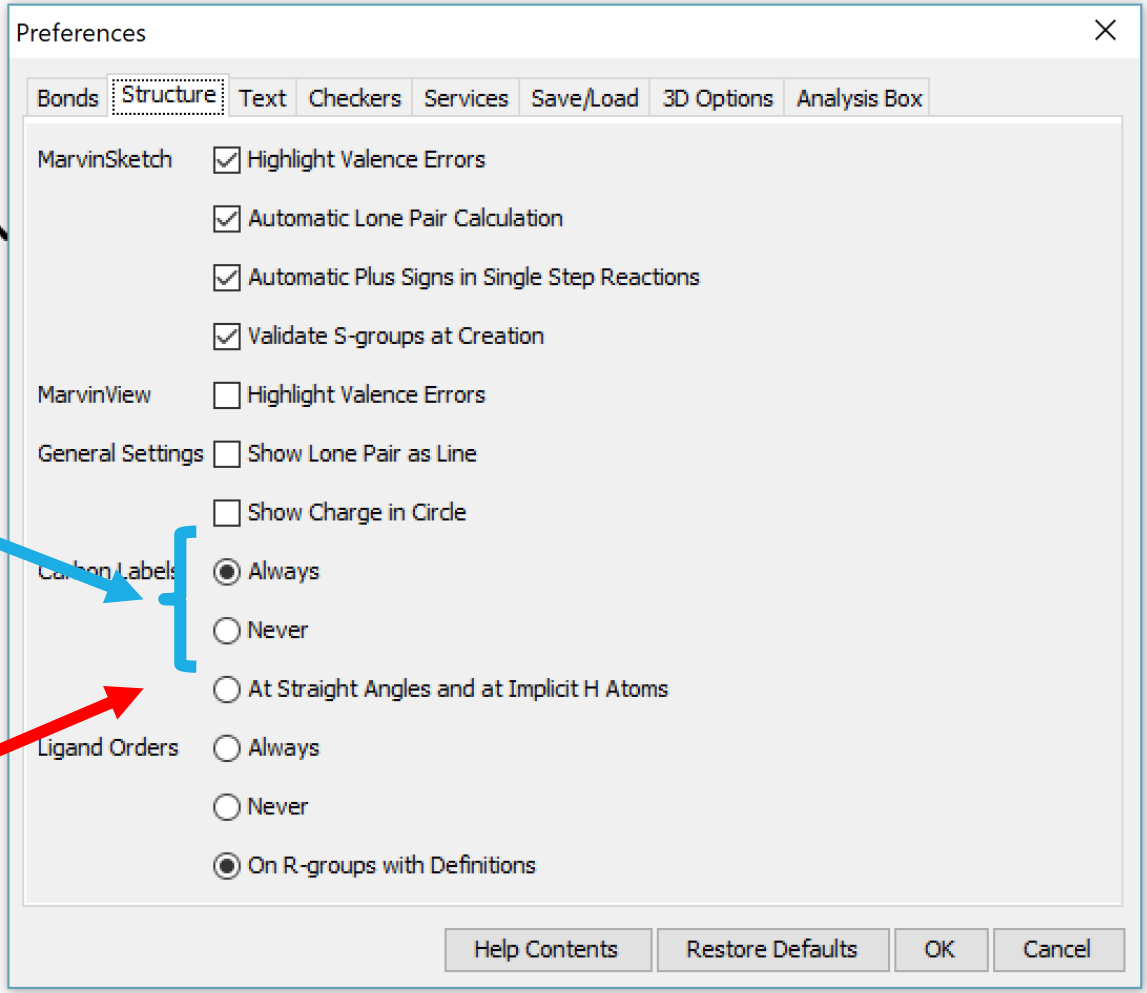


VAIHE 1: Hiilet näkeviin tai ei?

VAIHE1: Viivakaava tai täydellinen rakennekaava

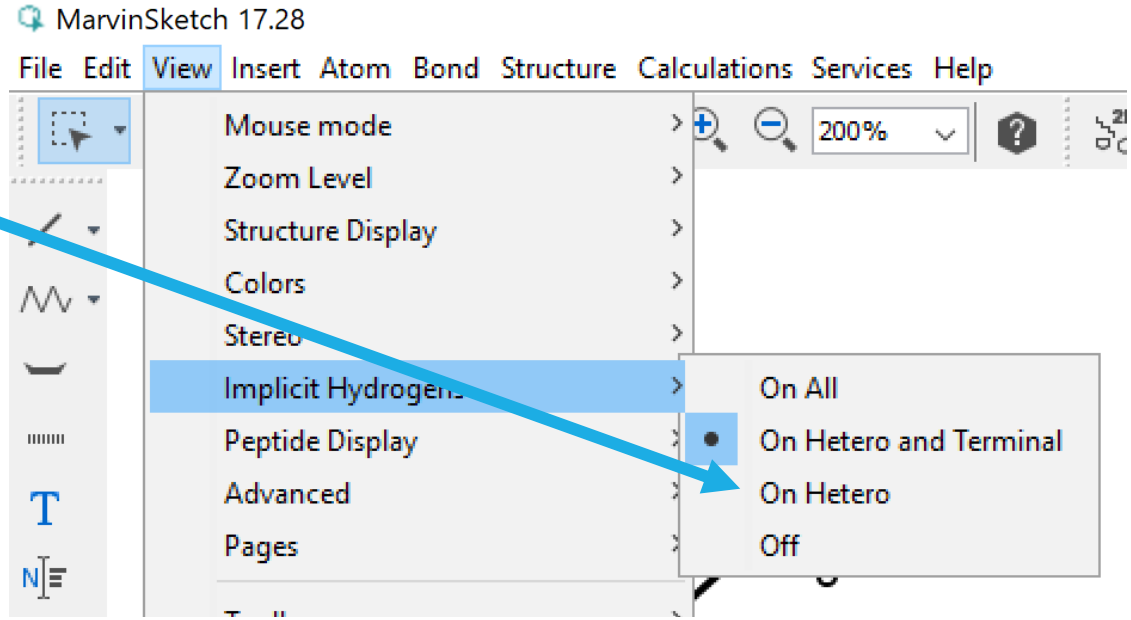
Valitaan se, **näytetäänkö hiilet lainkaan tai kaikki** (ei muita vaihtoehtoja käytetä!!!)

EI TÄTÄ



VAIHE 2: ”Implisiittiset vedyt”pois

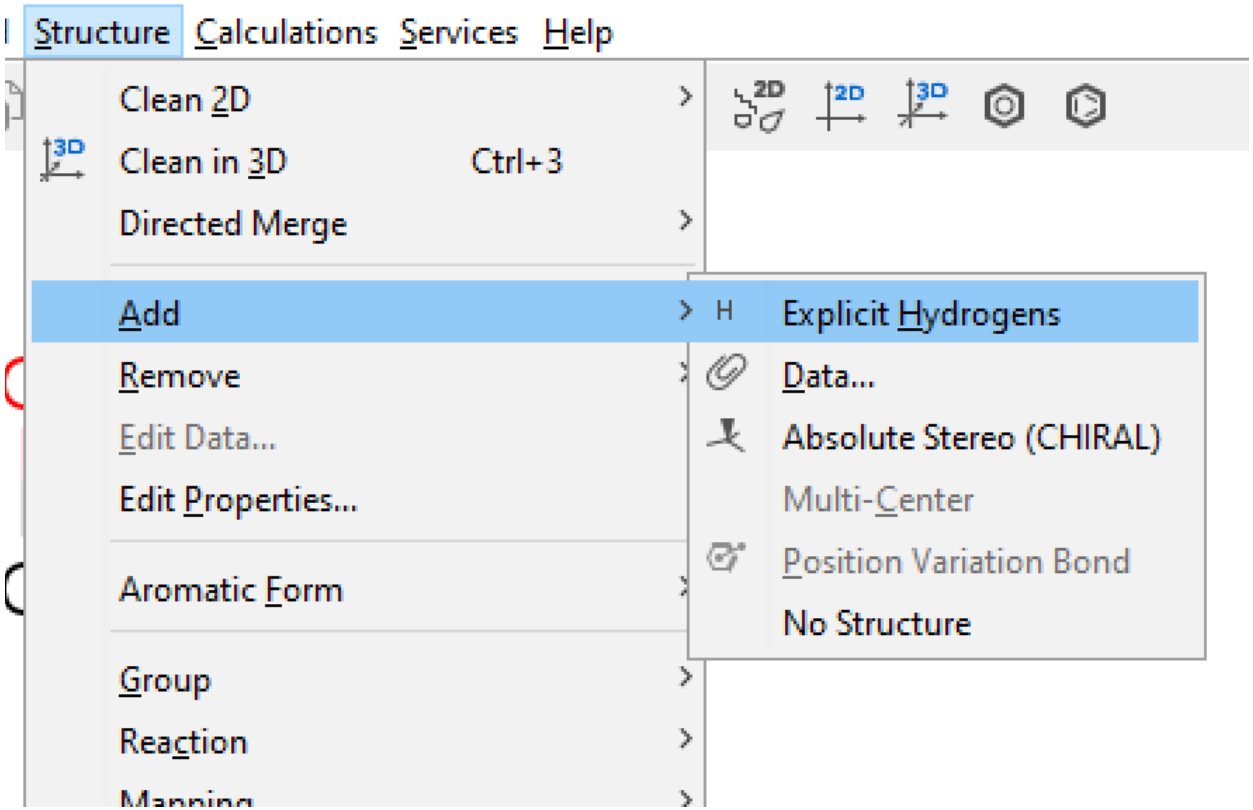
Varmistetaan vetyjen näkyminen **vain** ”**heteroatomien**” yhteydessä (**funktionaalinen ryhmä**).



Vaihe 3: Jos täydellinen rakennekaava →

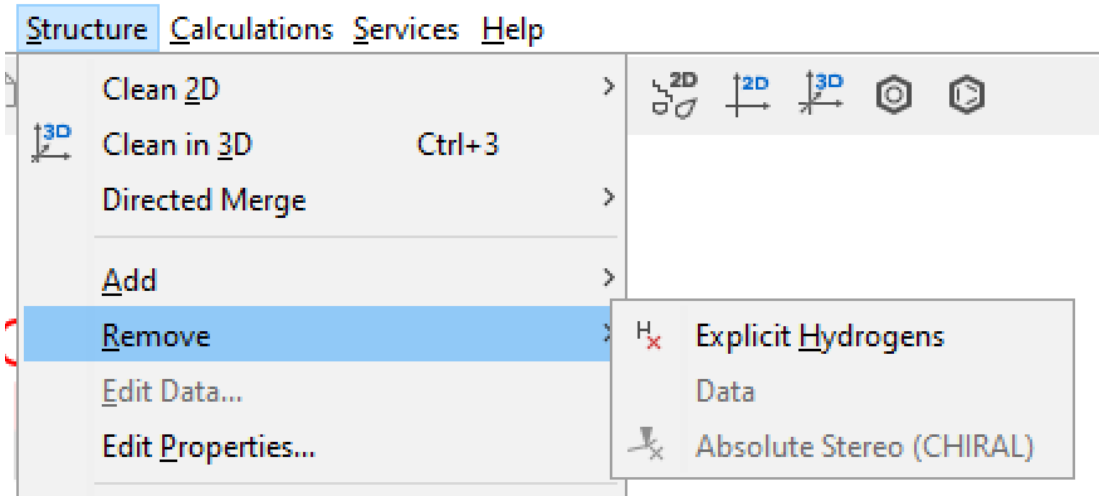
Täydelliseen rakennekaavaan valitaan ”Carbon labels” ALWAYS (Preferences -kohdasta). JA

Structure-kohdasta **Add Explicit Hydrogens**



Paluu viivakaavaan?

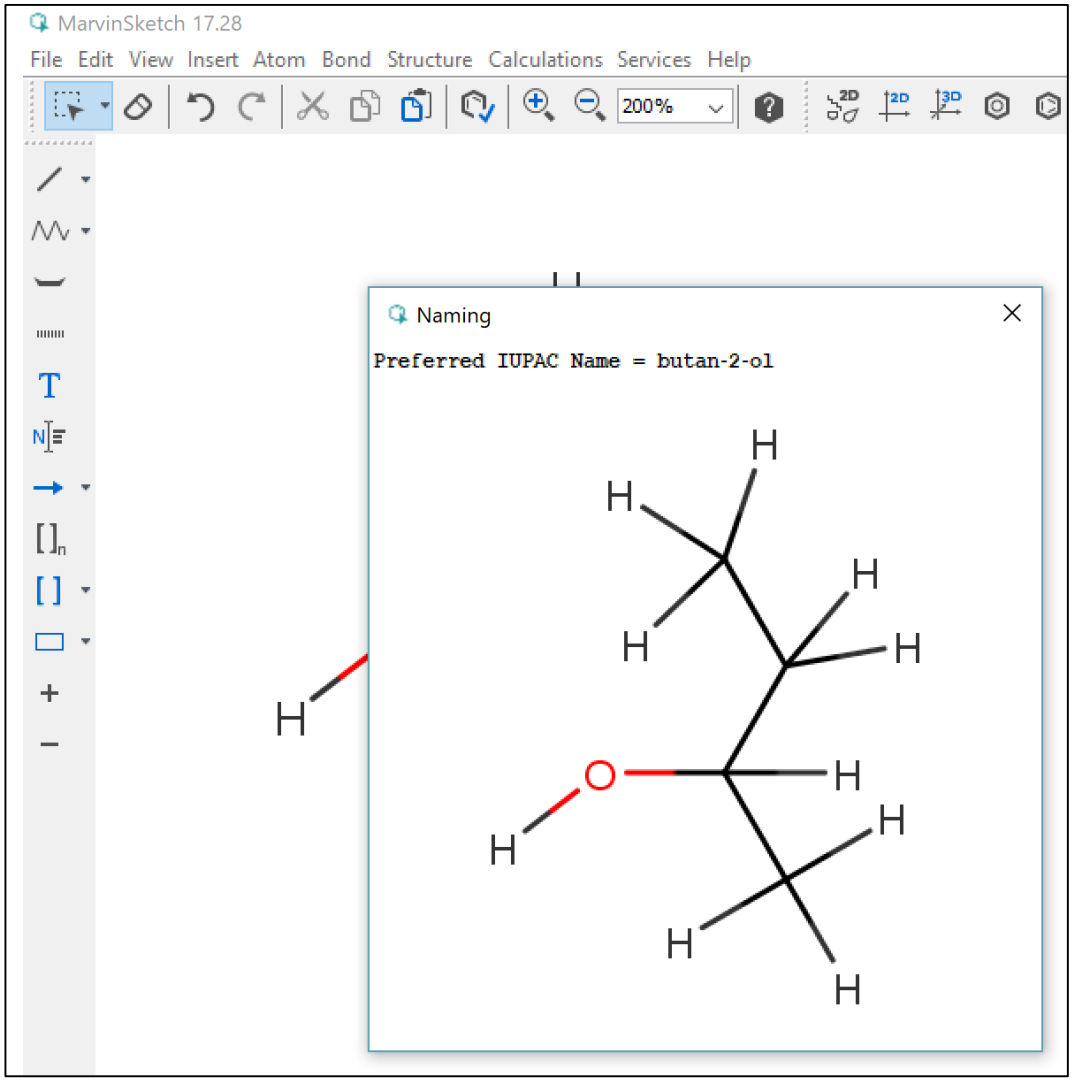
Jos haluaa palata viivakaava-esitysmuotoon. Poistetaan vedyt (viereinen kuva) ja poistetaan hiiliatomien merkinnät (Preferences –osiosta Carbon labels → Never)



MarvinSketch

Pedagogisia valintoja?

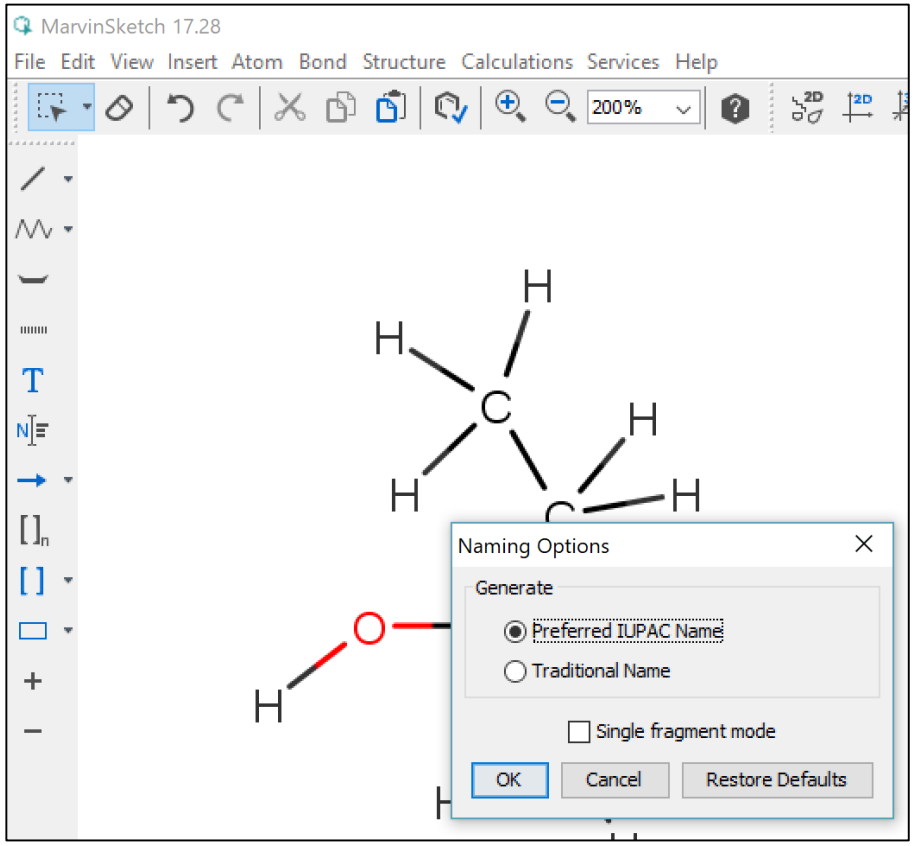
2. Nimeämisen opetus



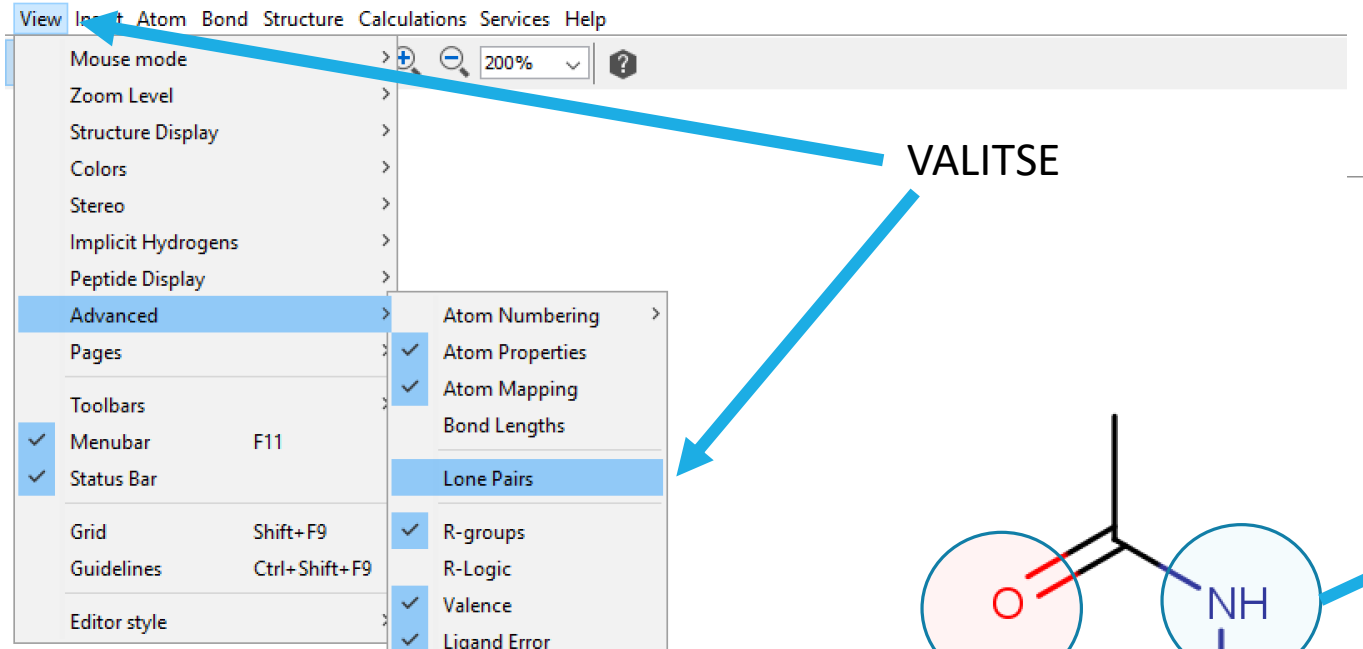
MarvinSketch nimeää molekyylit (myös Abitti-versiossa)

Miten kurssilla opetetaan orgaanisten molekyylien nimeäminen? Miksi?

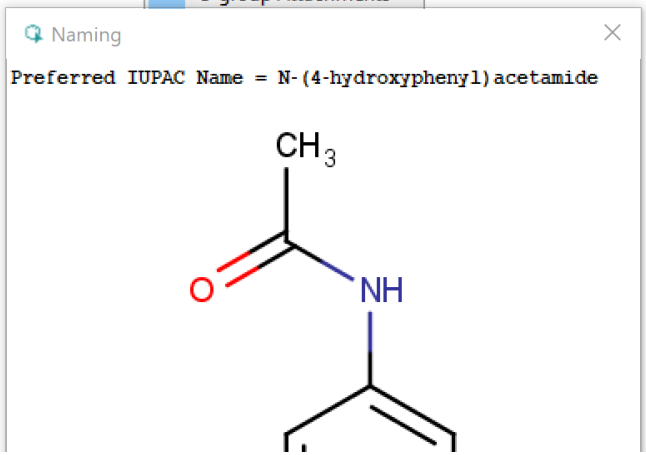
MarvinSketch tuottaa nimet ja toisinpäin – nimestä rakenteen.

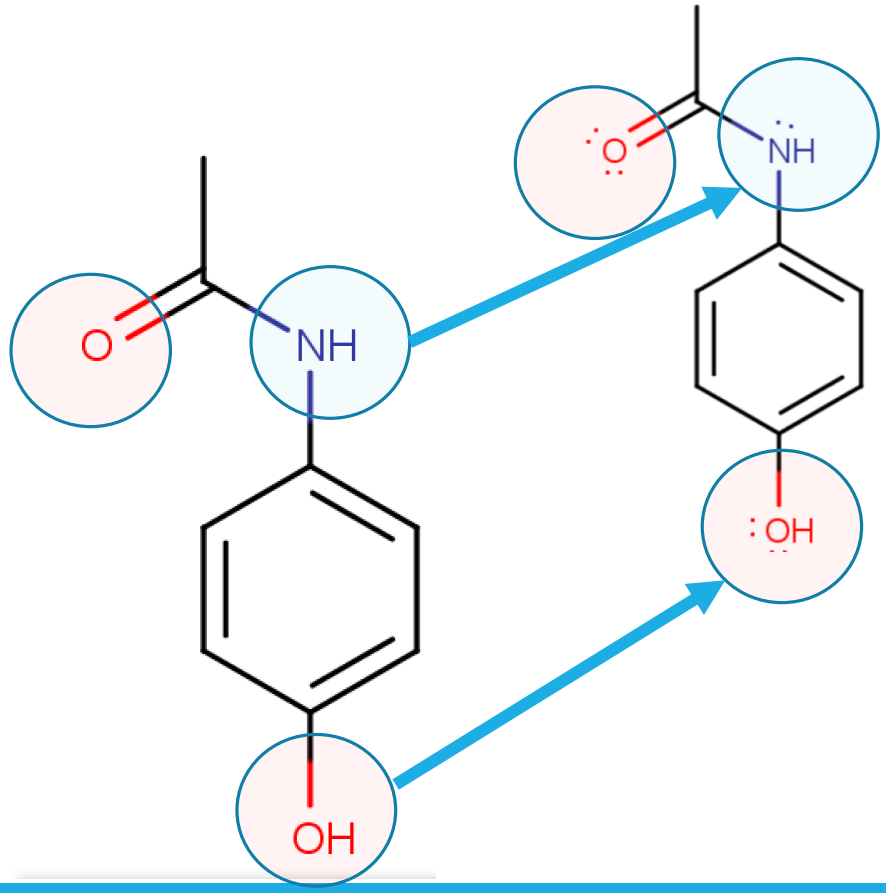


Vapaat elektroniparit

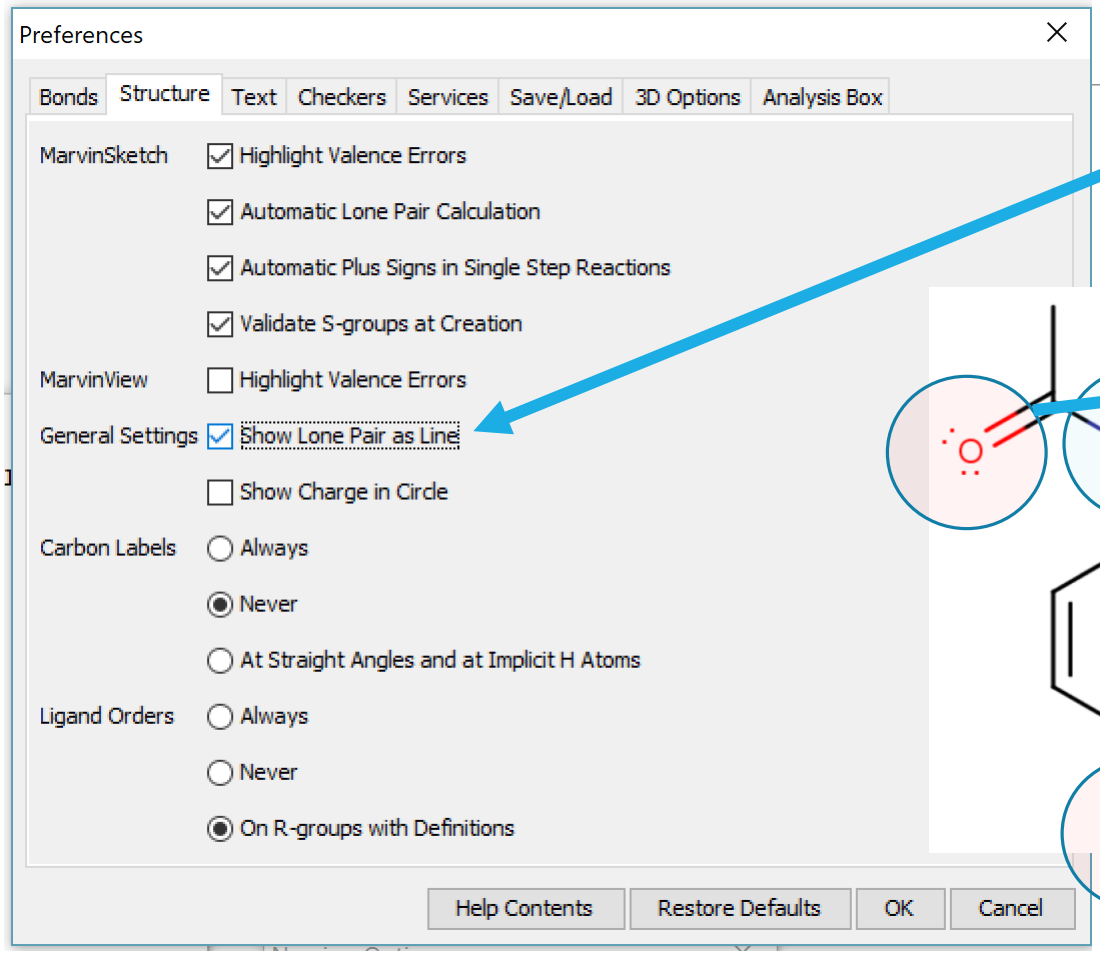


VALITSE

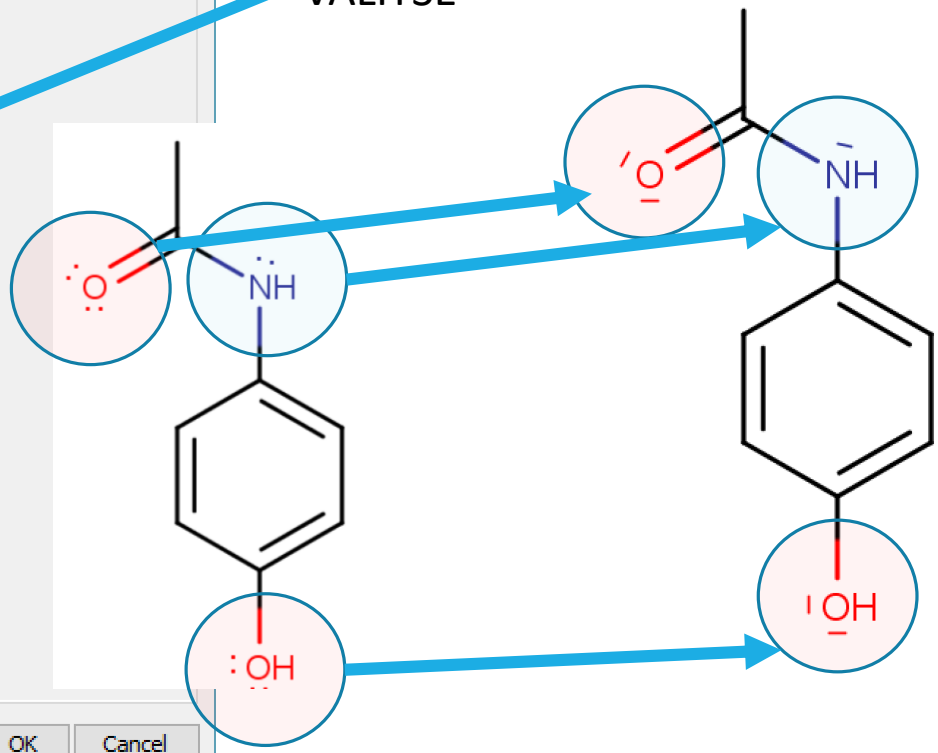




Vapaat elektroniparit viivalla



VALITSE



AEEF

MarvinSketch

Pedagogisia valintoja?

3. Isomerian opetus

KE2 – LOPS2003

Keskeiset sisällöt

- alkuaineiden ominaisuudet ja jaksollinen järjestelmä
- **elektroniverhon rakenne ja atomiorbitaalit**
- hapetuslukujen määräytyminen ja yhdisteen kaava
- kemiallinen sidos, sidosenergia (→ KE3) ja aineen ominaisuudet
- **atomiorbitaalien hybridisoituminen ja orgaanisten yhdisteiden sidos- ja avaruusrakenne**
- isomeria

KE2 – LOPS15

Keskeiset sisällöt

- kemian merkitys hyvinvoinnin ja terveyden kannalta
- orgaanisten yhdisteiden, kuten hiilivetyjen, happi- ja typpiyhdisteiden, **rakenteiden mallintaminen ja kuvaaminen erilaisilla malleilla**
- **avaruusrakenne** ja isomeria
- orgaanisten yhdisteiden ominaisuuksien selittäminen rakenteen avulla
- …
- aineen rakenteen analyysimenetelmät, kuten spektroskopia