

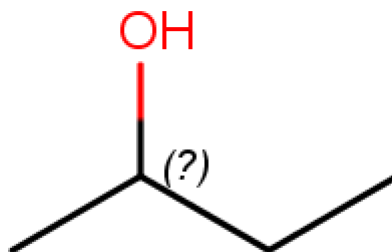
# MarvinSketch 3 – Isomeria

7.4.2019

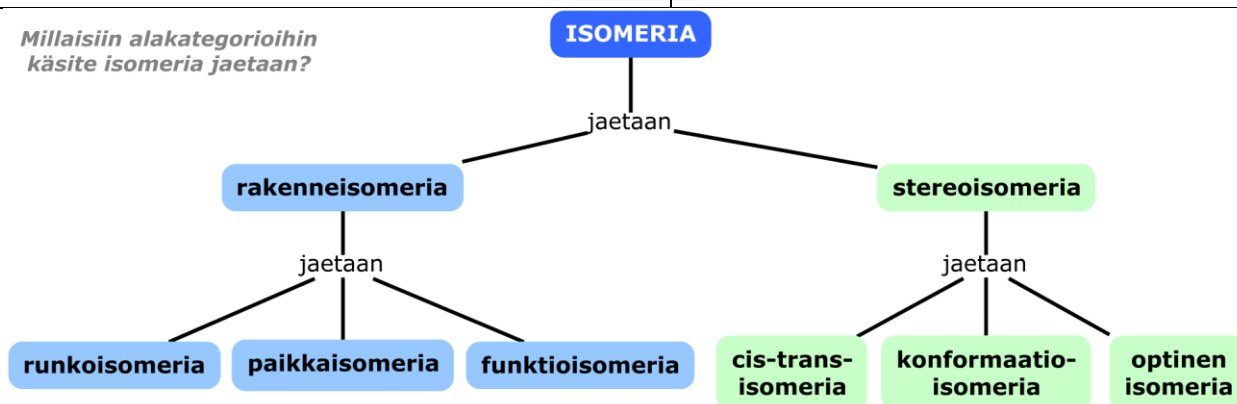
Aineita sanotaan toistensa **isomeereiksi**, jos niillä on sama molekyylikaava, mutta erilainen rakenne.

Kuvassa (kuva 1) on 2-butanolin viivakaavaan ilmestynyt kysymysmerkki (mikä ei tule automaattisesti). Tässä siirrytäänkin ohjeen teemaa eli **isomeriaan (kuva 2)**. MarvinSketch auttaa erityisesti stereoisomerian opetuksessa ja tuottamisessa.

Kuva 1.



Millaisiin alakategorioihin käsite isomeria jaetaan?



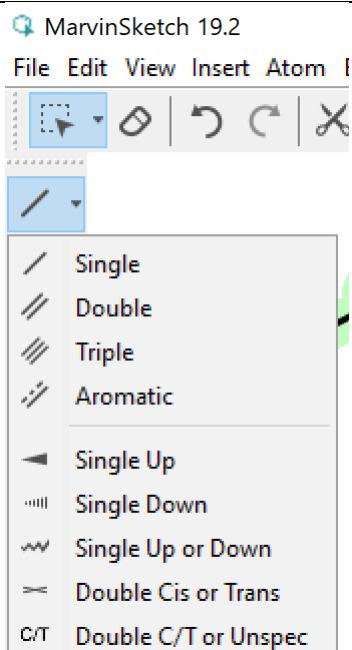
Kuva 2: Kuvio poimittu Orbitaali 2 -kirjasta.

## Sidoksien piirtäminen

Erialaisten sidoksien ja cis-trans-isomeriassa esiintyvien kaksoissidosten piirtäminen tapahtuu esim. vasemman reunan painikkeilla. (Kuva 3)

Kolme ensimmäistä valintaa kuvaavat perussidoksia (yksikertainen, kaksois- ja kolmoissidos).

Single Up ja Single Down -valinnat mahdollistavat 2D-ympäristössä kolmiulotteisen piirtämisen (Up kuvaa tilannetta, jossa atomi on tasosta ylöspäin, Down kuvaa tasosta alaspäin olevaa atomia). Näillä valinnoilla voidaan työstää peilikuvaisomeerien tarkentaa kuvaamista (kts. myöhemmin).



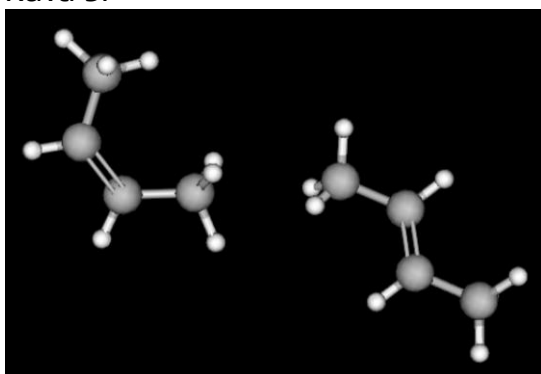
Kuva 3.

## cis-trans-isomeria ja E/Z-isomeria

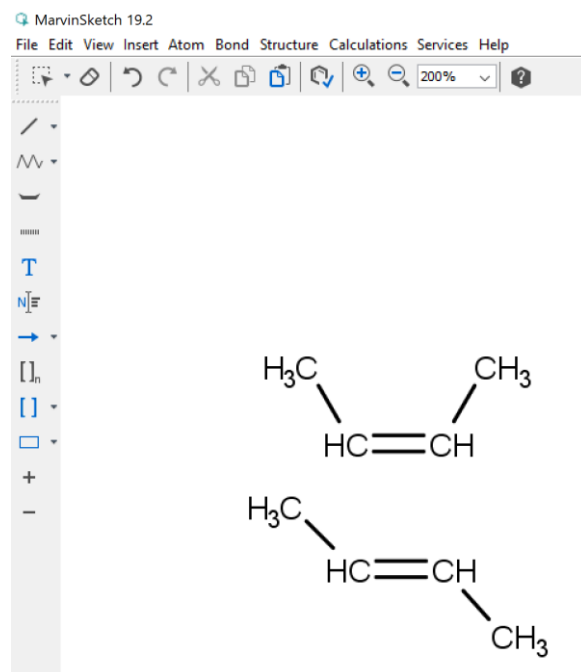
cis-trans-isomeerien piirtäminen perusasetuksilla ja (View | Implicit Hydrogen klikattuna) tuottaa viereisen kuvan mukaiset molekyylit (2-buteeni). Eri isomeerit saadaan tässä piirtämällä (kuva 4)

cis-trans-isomeerien rakenteessa merkittävä asia on molekyylien tasomainen rakenne kaksoissidoksen ympärillä (kts. kuva 5). MarvinSpace (3D-mallinnus) onnistuu pikanäppäimillä **ctrl+shift+M**. Tästä oma ohje.

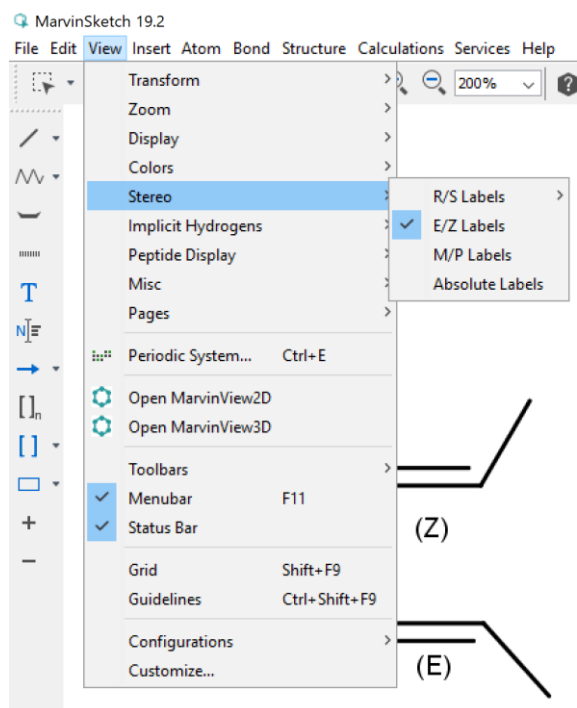
Kuva 5.



Kuva 4.



Kuva 6.

A screenshot of the MarvinSketch 19.2 software interface. The 'View' menu is open, and the 'Stereo' option is selected. A sub-menu is displayed, showing 'E/Z Labels' checked. Below the menu, two skeletal structures of 2-butene are shown. The top structure is labeled '(Z)' and the bottom structure is labeled '(E)'. The 'View' menu also shows other options like Transform, Zoom, Display, Colors, Implicit Hydrogens, Peptide Display, Misc, Pages, Periodic System..., Open MarvinView2D, Open MarvinView3D, Toolbars, Menubar (F11), Status Bar, Grid (Shift+F9), Guidelines (Ctrl+Shift+F9), Configurations, and Customize...

MarvinSketch osaa määrittellä molekyylin rakenteesta onko sillä mm. **cis-trans-isomeriaa**. Tarkemmin sanottuna **E/Z-isomeriaa** (mikä on rinnastettavissa cis-trans-isomeriaan kaksoissidoksellisten yhdisteiden tapauksissa). Se voi antaa E/Z-merkinnän automaattisesti.

Kuvassa 6 on em. tilanteen valinta kuvattu View | Stereo | E/Z Labels. Taustalla näkyy kuinka 2-buteenin viivakaavoissa merkintä ilmenee.

Jos E tai Z -kirjain-merkintää ei "ilmesty" molekyyliin (kun E/Z Labels valinta on aktiivinen), kyseessä on molekyylistä, jolla ei ole E/Z- tai cis-trans-isomeriaa.

## Peilikuvaisomeria

Peilikuvaisomeriassa asymmetriseen (kiraaliseen) hiileen on kiinnittyneenä neljä erilaista atomia, hiiliketjua tai toiminnallista ryhmää. Viereisessä kuvassa vasemman puoleiseen hiileen on liittyneenä hydroksyyliiryhmä -OH, aminoryhmä NH<sub>2</sub>, karboksyyliiryhmä -COOH ja vety-atomia, mikä ei näy viivakaavassa (kuva 7).

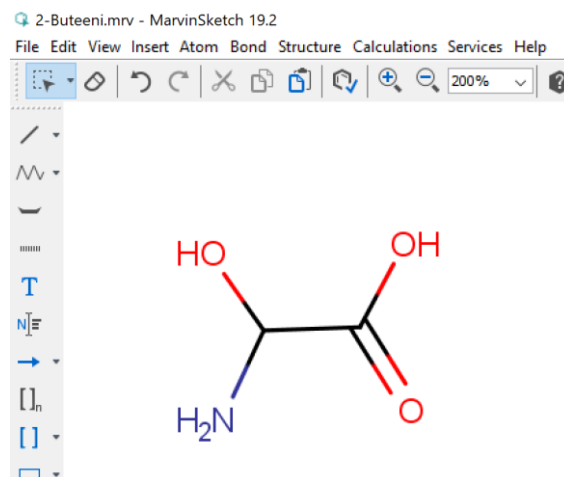
Kuvissa on käytössä siis **viivakaava-oletus** (Edit | Preferences | Carbon Labels | Never ja View | Implicit Hydrogens | On Hetero).

Kuvassa 8. näkyvä **kysymysmerkki** viittaa siihen, että ko. hiiliatomi on asymmetrinen (kiraalinen) eli **peilikuvasyymmetrian aiheuttava hiiliatomi**. Ohjelma tunnistaa peilikuvaisomerian aiheuttavat hiiliatomit, jos ko. asetus on laitettu päälle.

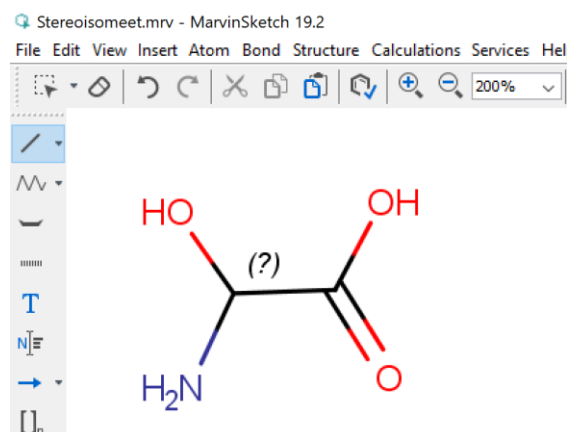
Kuvassa 9 näkyy valinta, jolla saa ensin kysymysmerkin näkyviin: **View | Stereo | R/S Labels | All Possible**. Oletusarvona ohjelmassa on se, ettei se anna tätä tietoa.

Miksi kysymysmerkki? 2D-mallissa ei ole avaruudellista rakennetta kuvattuna eli ohjelma ei tiedä, onko kyseessä R- tai S-isomeeri. Se saadaan näkyviin muokkaamalla piirrosta (kuva 10).

Kuva 7.



Kuva 8.



Kuva 9.

Stereoisomeet.mrv - MarvinSketch 19.2

File Edit **View** Insert Atom Bond Structure Calculations Services Help

Transform > 200% ?

Zoom >

Display >

Colors >

**Stereo** >

- R/S Labels >  All Possible
- E/Z Labels All
- M/P Labels Absolute Stereo
- Absolute Labels None

Implicit Hydrogens >

Peptide Display >

Misc >

Pages >

Periodic System... Ctrl+E

Open MarvinView2D

Open MarvinView3D

Kuvassa 10 on asymmetrisen hiilen ja hydroksyyli­ryhmän -OH välisen sidoksen piirretty katkoviivalla (Single Down, ks. kuva 11).

Kuva 11.

MarvinSketch 19.2

File Edit View Insert Atom I



- Single
- Double
- Triple
- Aromatic
- Single Up
- Single Down
- Single Up or Down
- Double Cis or Trans
- Double C/T or Unspec

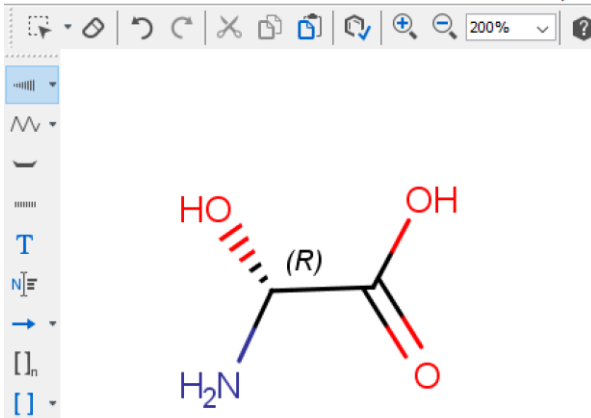
Kuvaan 12 on piirretty molemmat peilikuvaisomeerit ja käytetty kuvan 11 Single Up ja Down -valintoja.

Molekyylien hahmottaminen onnistuu parhaiten **3D-tilassa** (MarvinSpace), johon molekyylit saadaan pikanäppäilemällä: **ctrl+shift+M** (kuva 13). MarvinSpace-ohjelman käytöstä on oma ohje.

Kuva 10.

2-Buteeni.mrv - MarvinSketch 19.2

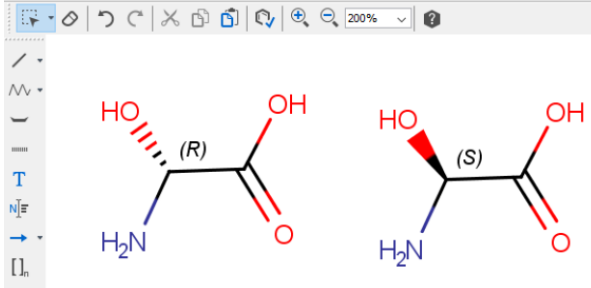
File Edit View Insert Atom Bond Structure Calculations Services Help



Kuva 12.

Stereoisomeet.mrv - MarvinSketch 19.2

File Edit View Insert Atom Bond Structure Calculations Services Help



Kuva 13.

