

# MarvinSketch

Marika Suovanen

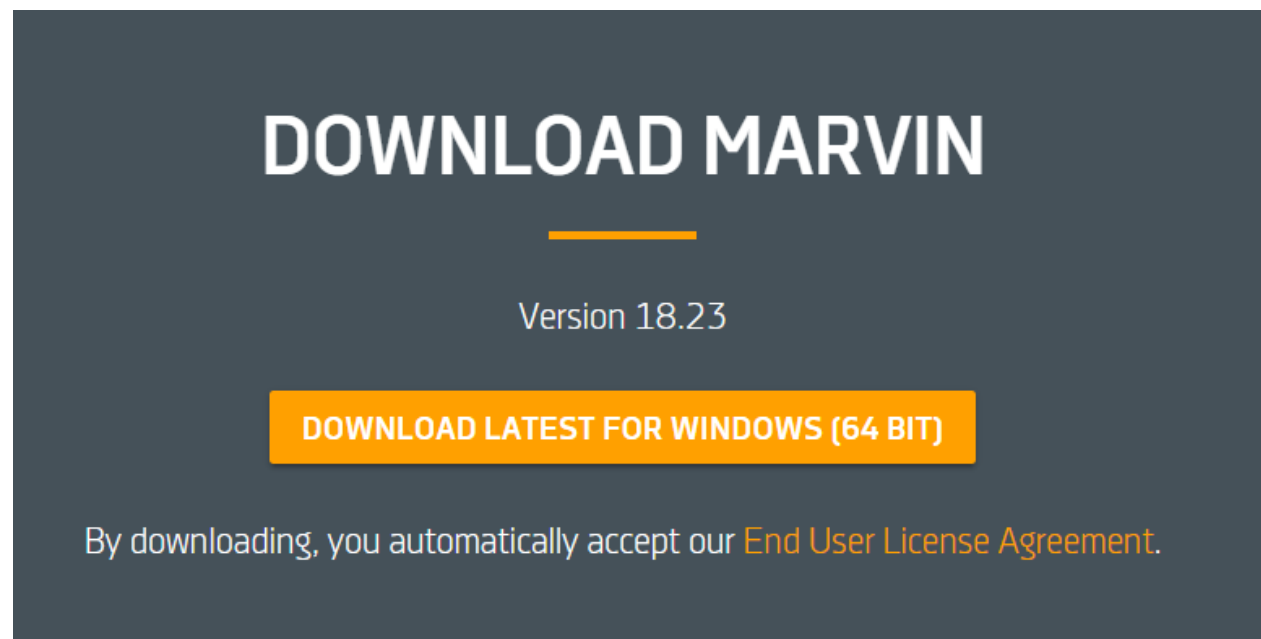
Ari Myllyviita

Materiaali on syyspäivien pedanet-sivuilla

# Miten ja mistä?

Lataus **ilman kirjautumista**

<https://chemaxon.com/products/marvin/download>



The image shows a dark grey rectangular box with white and orange text. At the top, the words "DOWNLOAD MARVIN" are written in large, bold, white capital letters. Below this, a thin orange horizontal line is centered. Underneath the line, the text "Version 18.23" is displayed in a smaller, white font. In the center of the box, there is a prominent orange button with the text "DOWNLOAD LATEST FOR WINDOWS (64 BIT)" in white capital letters. At the bottom of the box, a line of white text reads: "By downloading, you automatically accept our [End User License Agreement](#)."

**DOWNLOAD MARVIN**

Version 18.23

**DOWNLOAD LATEST FOR WINDOWS (64 BIT)**

By downloading, you automatically accept our [End User License Agreement](#).



## Java versions & OLE Editor

Please note that Marvin is not yet compatible with macOS Mojave. From version 17.29.0 **our tools run on Java 8**. Marvin is compatible with Java 10 too from version 18.11. Also please **install .NET Marvin component** with the Windows 32 bit version to use OLE Editor functions in Marvin.

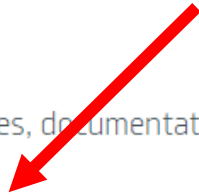


### Windows

Includes Marvin desktop applications, API, examples, documentation.

[DOWNLOAD 64 BIT](#)

[DOWNLOAD 32 BIT](#)



### Mac OS X

Drag and Drop installer for Marvin desktop application.

[DOWNLOAD .DMG](#)

## Java SE Runtime Environment 8 Downloads

Do you want to run Java™ programs, or do you want to develop Java programs? If you want to run Java programs, but not develop them, download the Java Runtime Environment, or JRE™.

If you want to develop applications for Java, download the Java Development Kit, or JDK™. The JDK includes the JRE, so you do not have to download both separately.

[JRE 8u181 Checksum](#)

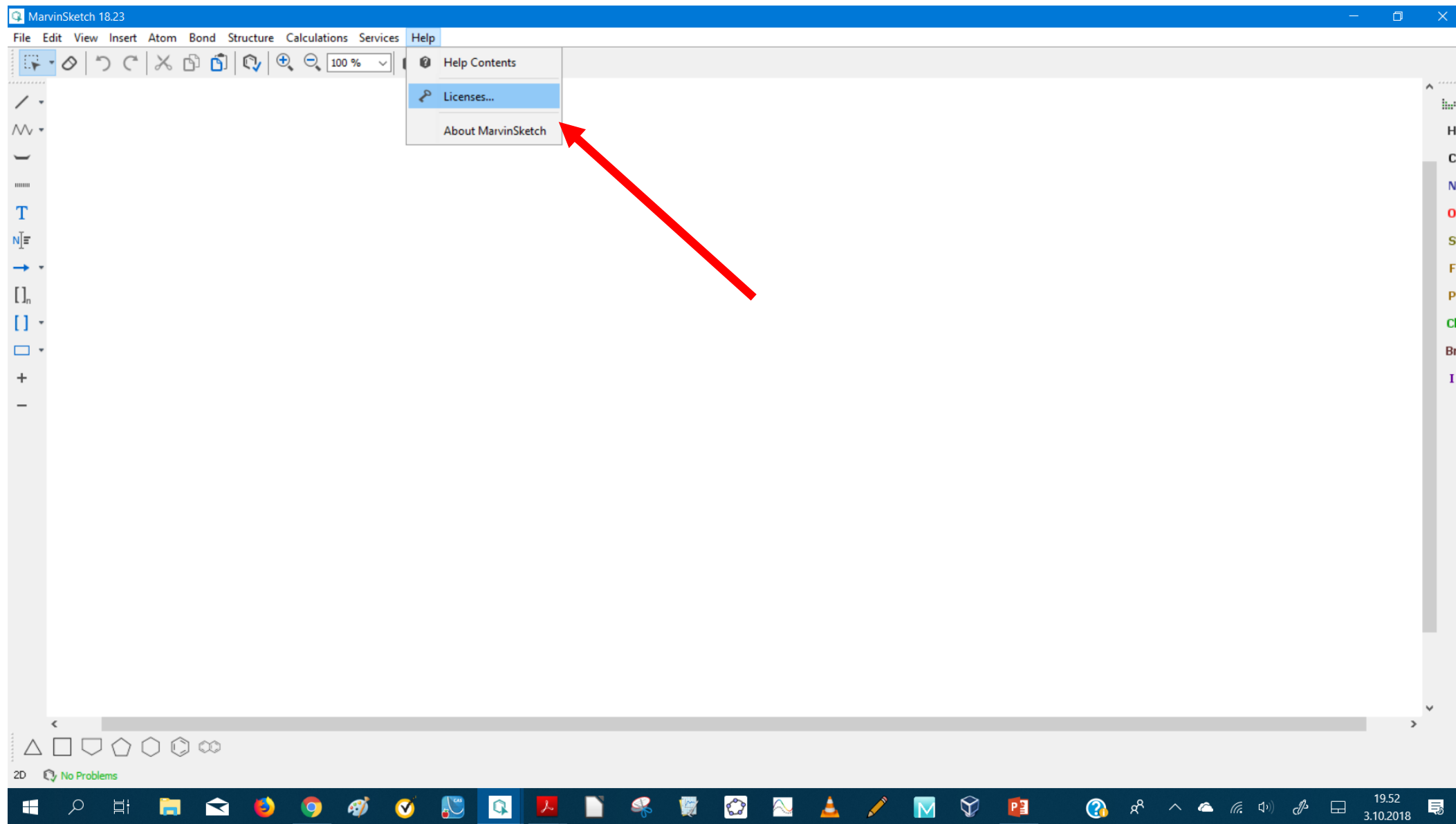
### Java SE Runtime Environment 8u181

You must accept the [Oracle Binary Code License Agreement for Java SE](#) to download this software.

Accept License Agreement  Decline License Agreement

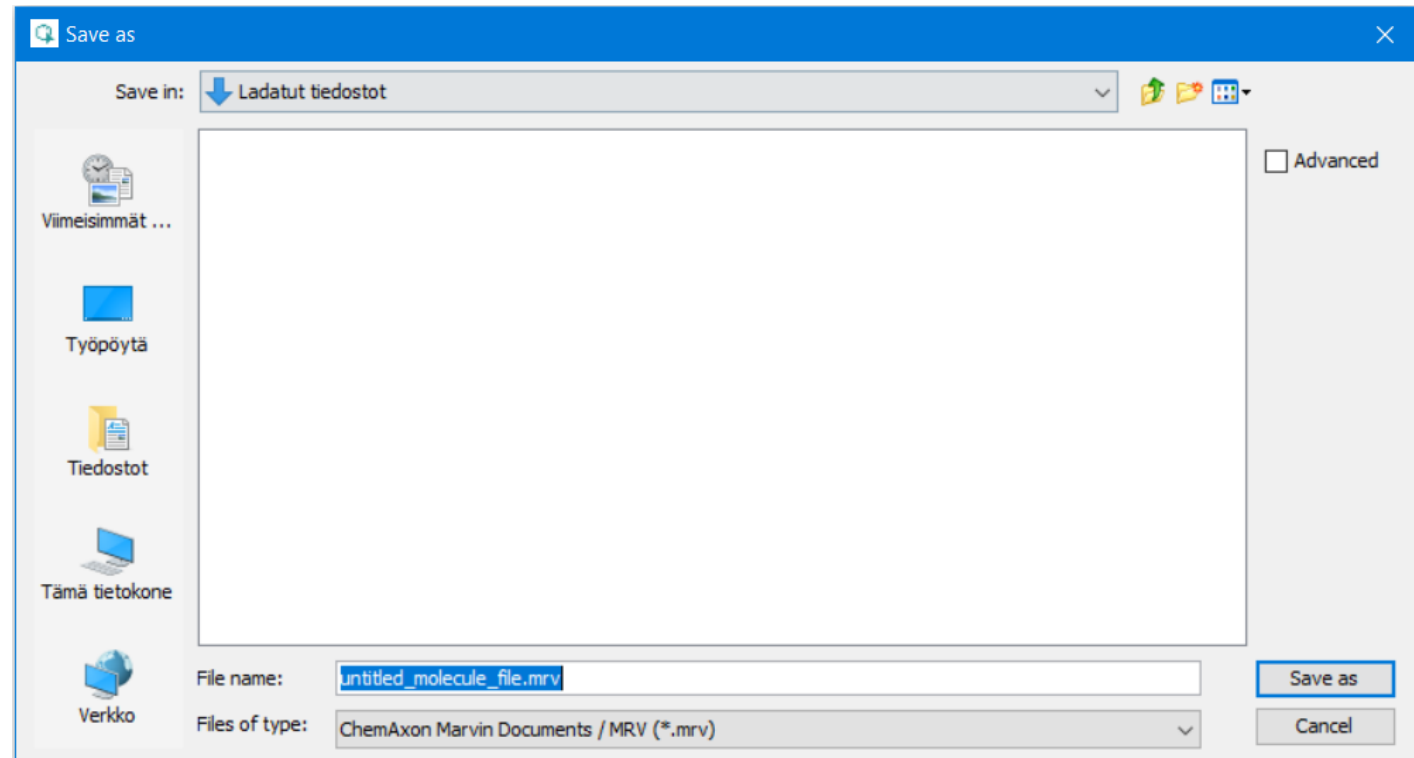
Product / File Description	File Size	Download
Linux x86	64.49 MB	<a href="#">jre-8u181-linux-i586.rpm</a>
Linux x86	80.4 MB	<a href="#">jre-8u181-linux-i586.tar.gz</a>
Linux x64	61.45 MB	<a href="#">jre-8u181-linux-x64.rpm</a>
Linux x64	77.43 MB	<a href="#">jre-8u181-linux-x64.tar.gz</a>
Mac OS X x64	74.58 MB	<a href="#">jre-8u181-macosx-x64.dmg</a>
Mac OS X x64	66.23 MB	<a href="#">jre-8u181-macosx-x64.tar.gz</a>
Solaris SPARC 64-bit	52.31 MB	<a href="#">jre-8u181-solaris-sparcv9.tar.gz</a>
Solaris x64	50.09 MB	<a href="#">jre-8u181-solaris-x64.tar.gz</a>
Windows x86 Online	1.81 MB	<a href="#">jre-8u181-windows-i586-iftw.exe</a>
Windows x86 Offline	61.55 MB	<a href="#">jre-8u181-windows-i586.exe</a>
Windows x86	64.86 MB	<a href="#">jre-8u181-windows-i586.tar.gz</a>
Windows x64	68.47 MB	<a href="#">jre-8u181-windows-x64.exe</a>
Windows x64	68.94 MB	<a href="#">jre-8u181-windows-x64.tar.gz</a>

- Opettaja voi pyytää lisenssiä (saa jakaa oppilaille)



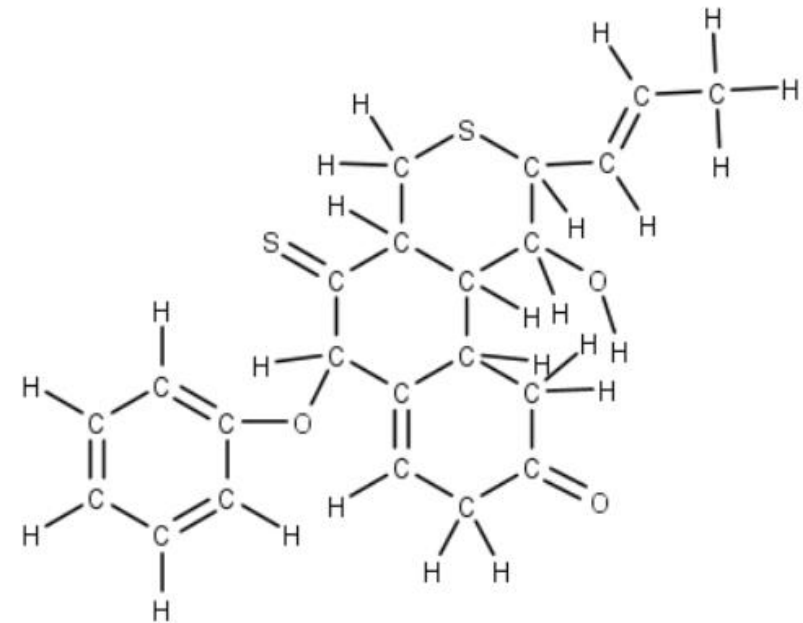
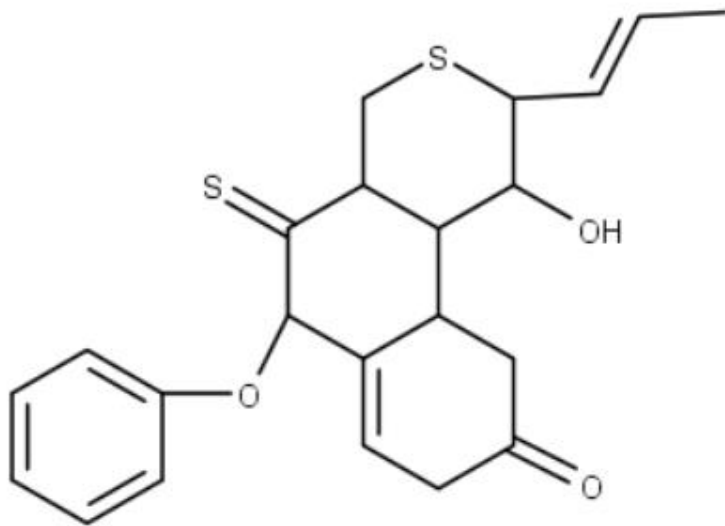
# Oppilaan pitäisi osata seuraavat asiat:

- Tunnistettava päätteestä **.mrv** että on kyseessä **MarvinSketch-tiedosto**

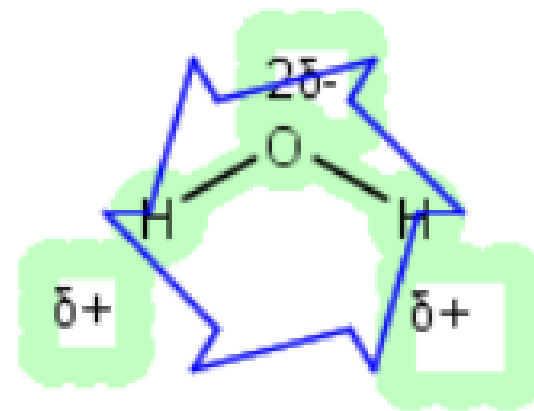
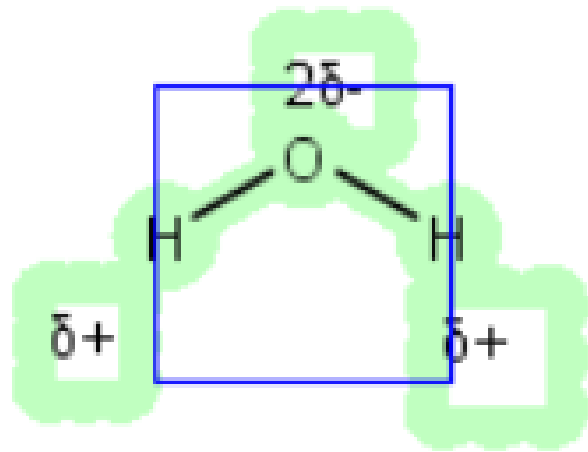


- **Täydellinen kaava/viivakaava** (hiilet ja vedyt näkyviin sekä pois)

- Edit / Preferences / Structure / Carbon labels
- View / Implicit Hydrogens / On All
- Structure / Add / Explicit Hydrogens

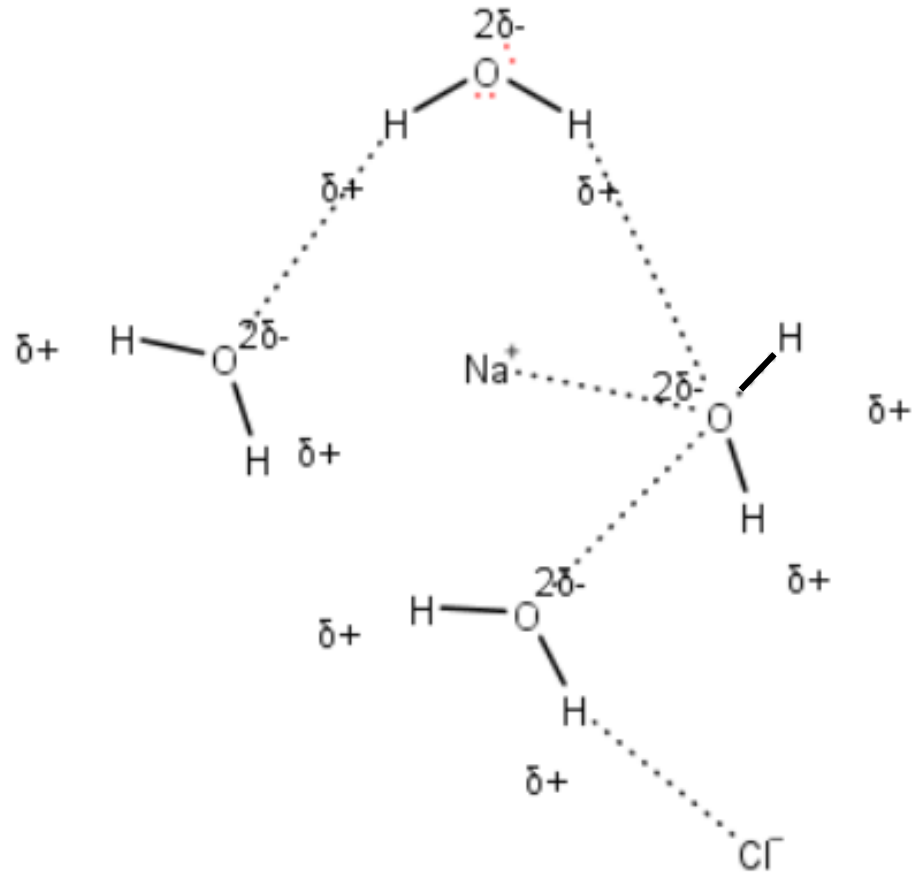


- Molekyylin siirtäminen ja kääntäminen



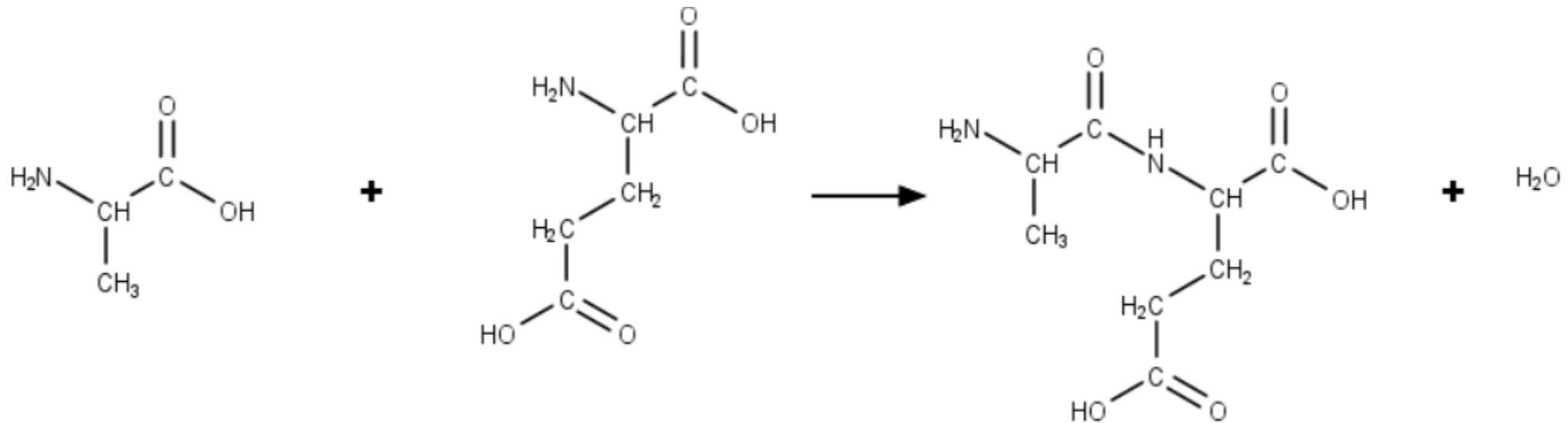


- Heikkojen sidosten piirtäminen, ioniyhdisteen piirtäminen

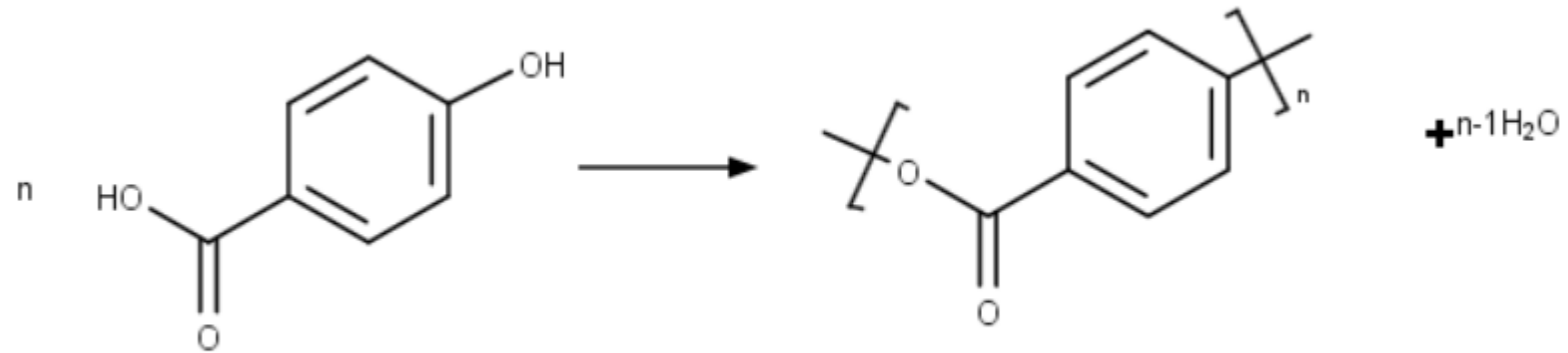


- Reaktioyhtälöiden kirjoittaminen (copy-paste-toiminto)

- Insert / Template (esim. aminohapot)
- $\text{NH}_2$ -ryhmä vietään  $\text{OH}$ -ryhmän päälle  $\rightarrow$  peptidisidos
- $\text{OH}$ -ryhmä vietään  $\text{NH}_2$ -ryhmän päälle  $\rightarrow$  esterisidos

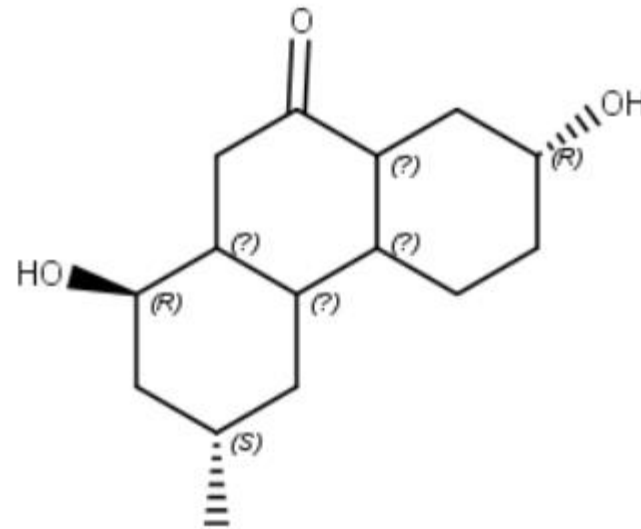
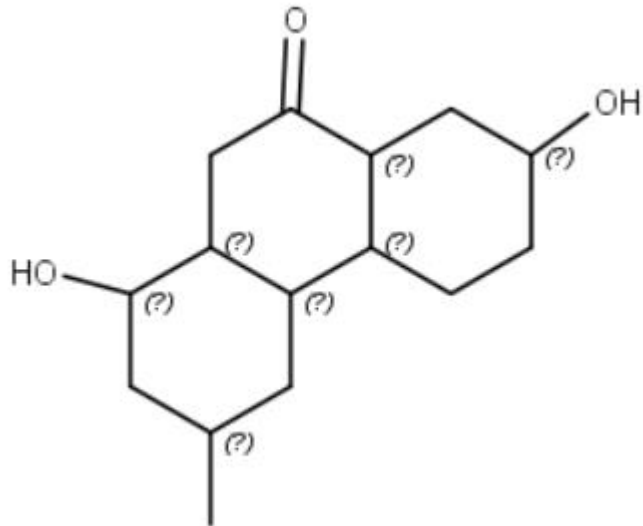


- Polymeerien piirtäminen
  - Valitse  $[ ]_n$  ja SRU polymer (n)



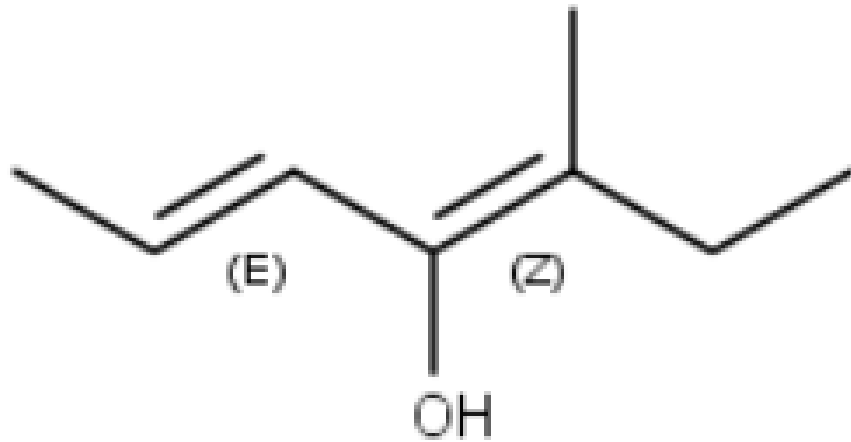
# Oppilaan on hyvä osata myös nämä:

- Asymmetrisen hiilen hakeminen
  - View / Stereo / R/S-labels



- E/Z-toiminto

- View / Stereo / E/Z



- Nimeäminen

Place Analysis Box      Ctrl+I

Generate Name...

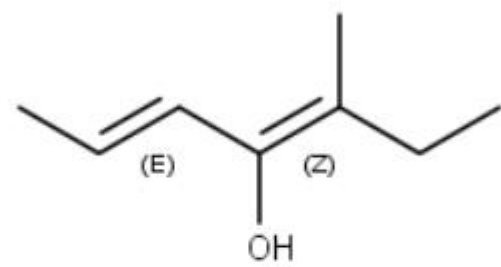
Name to Structure      Ctrl+Shift+N

The Source - Name

File Edit

acetylsalicylic acid

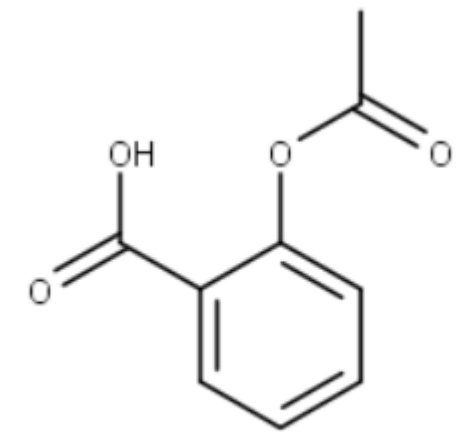
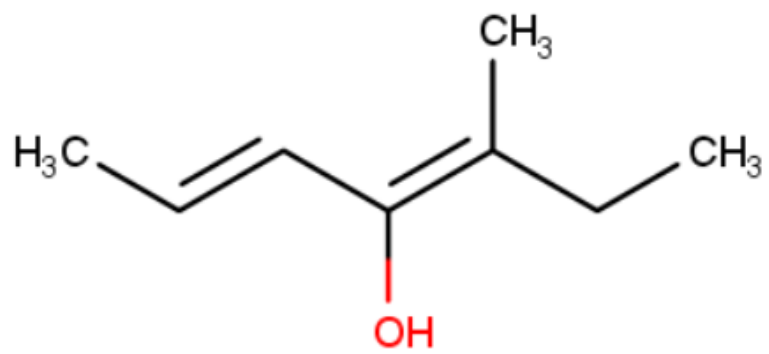
Import



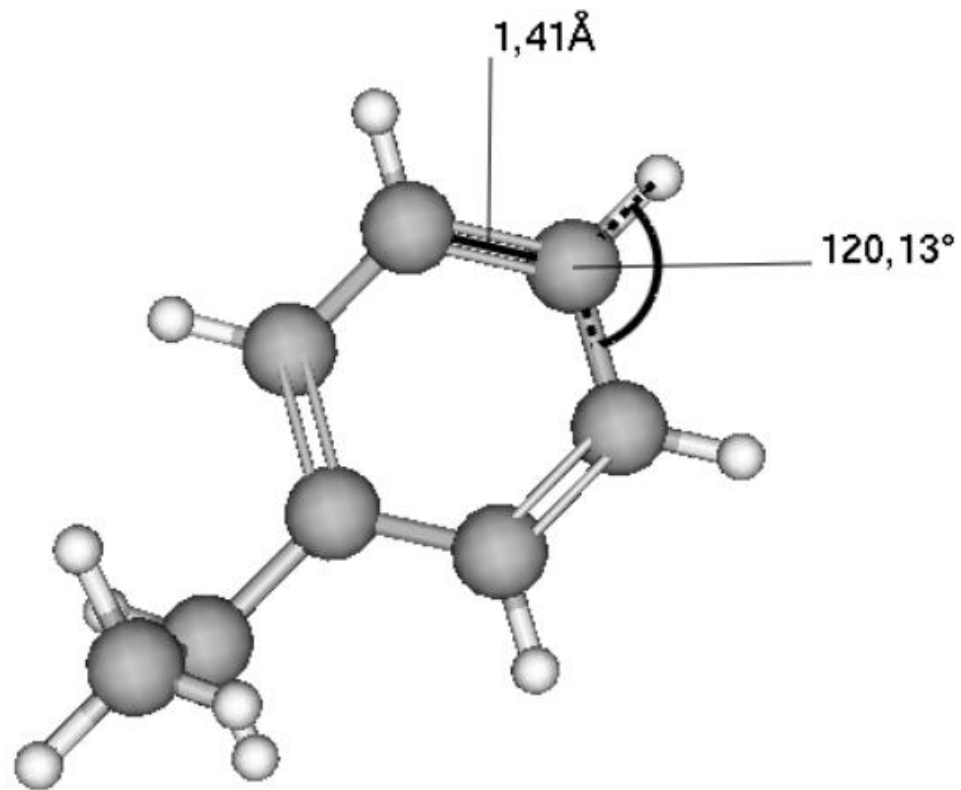
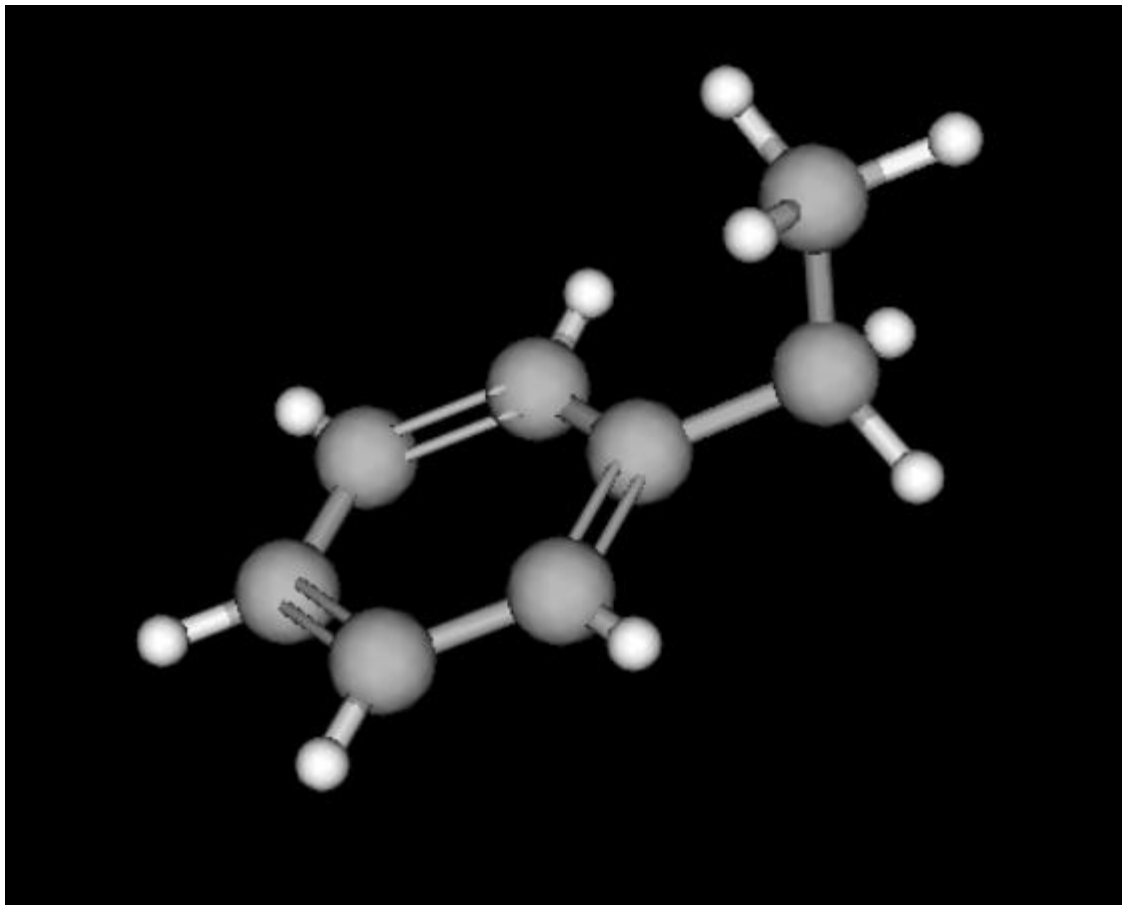
Naming

Preferred IUPAC Name = (2E,4Z)-5-methylhepta-2,4-dien-4-ol

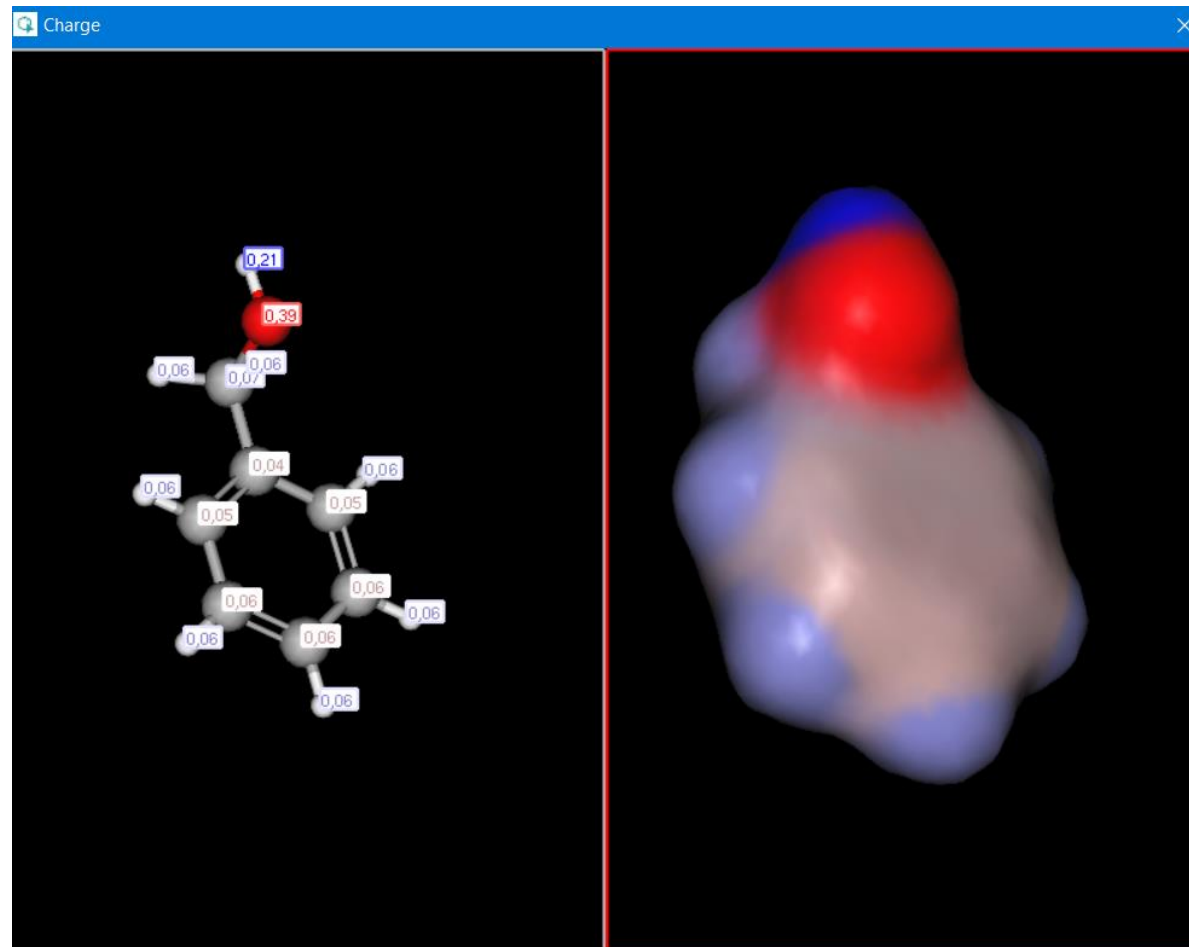
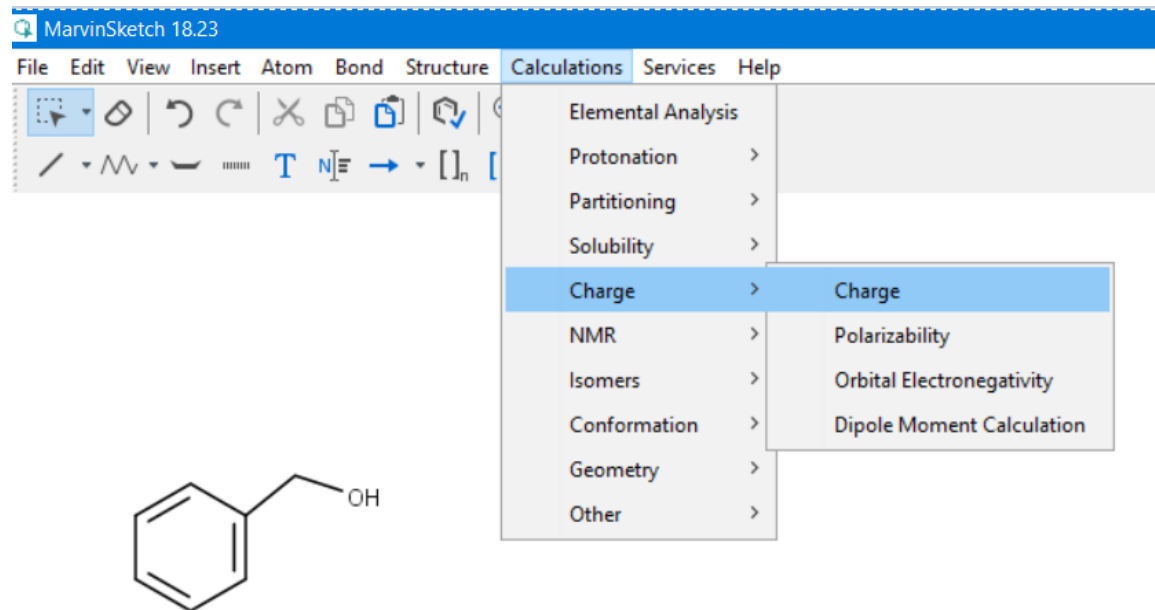
Name: (2E,4Z)-5-methylhepta-2,4-dien-4-ol  
Molecular weight: 126,20  
Formula: C<sub>8</sub>H<sub>14</sub>O



- Marvin Space ( ctrl + shift + m)

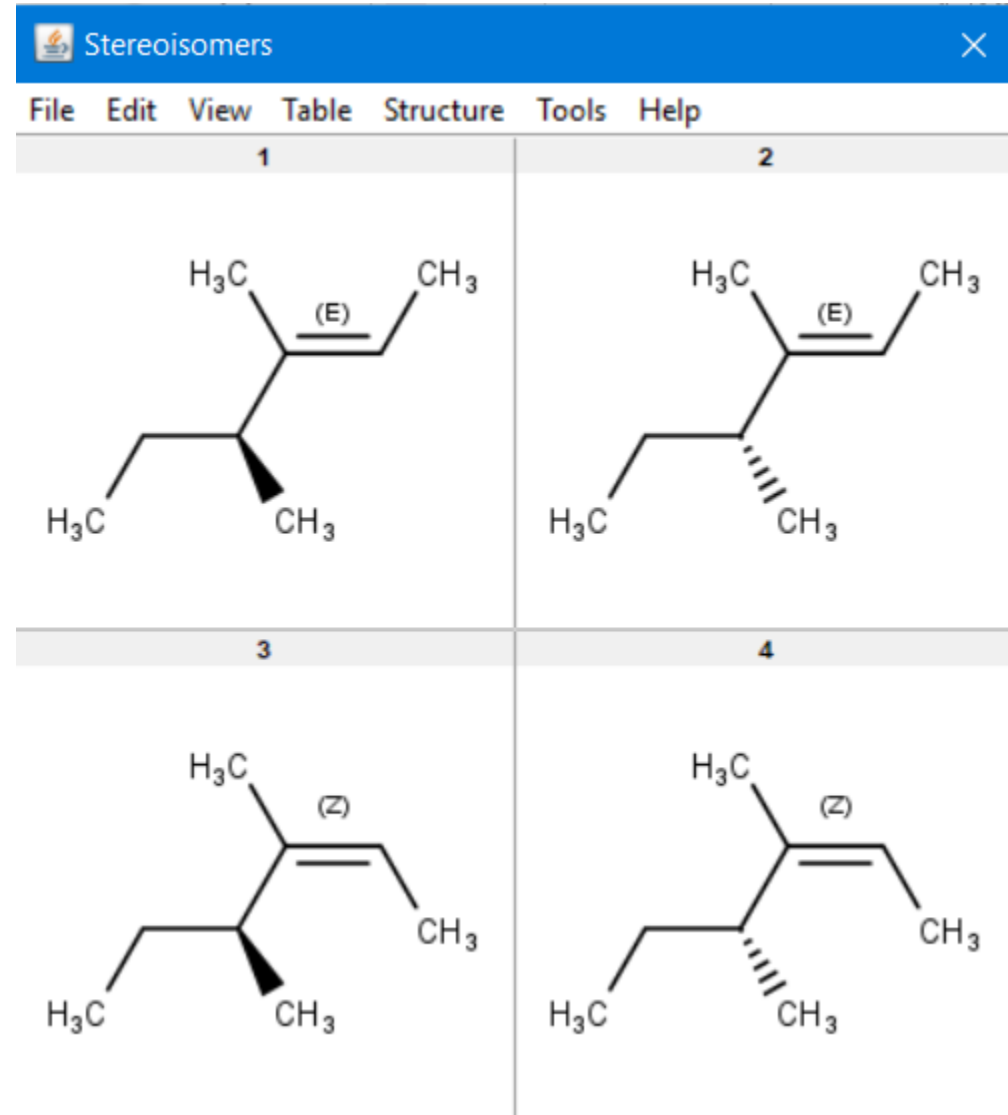
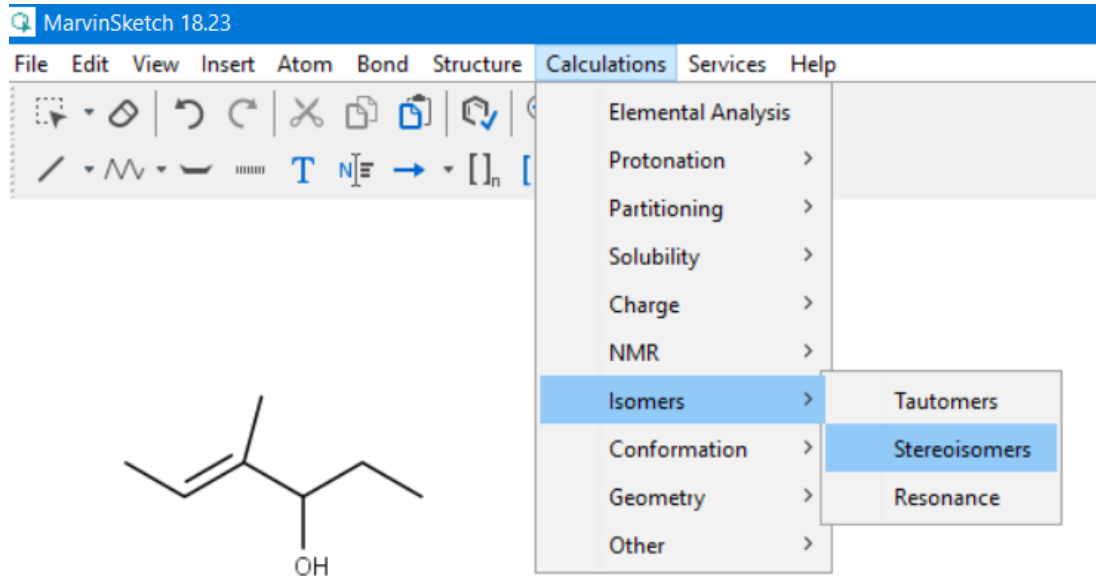


- Poolisuuden tutkiminen





- Stereoisomeerit (lisenssillä)

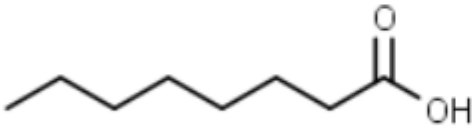


- Työkalu opettajalle?

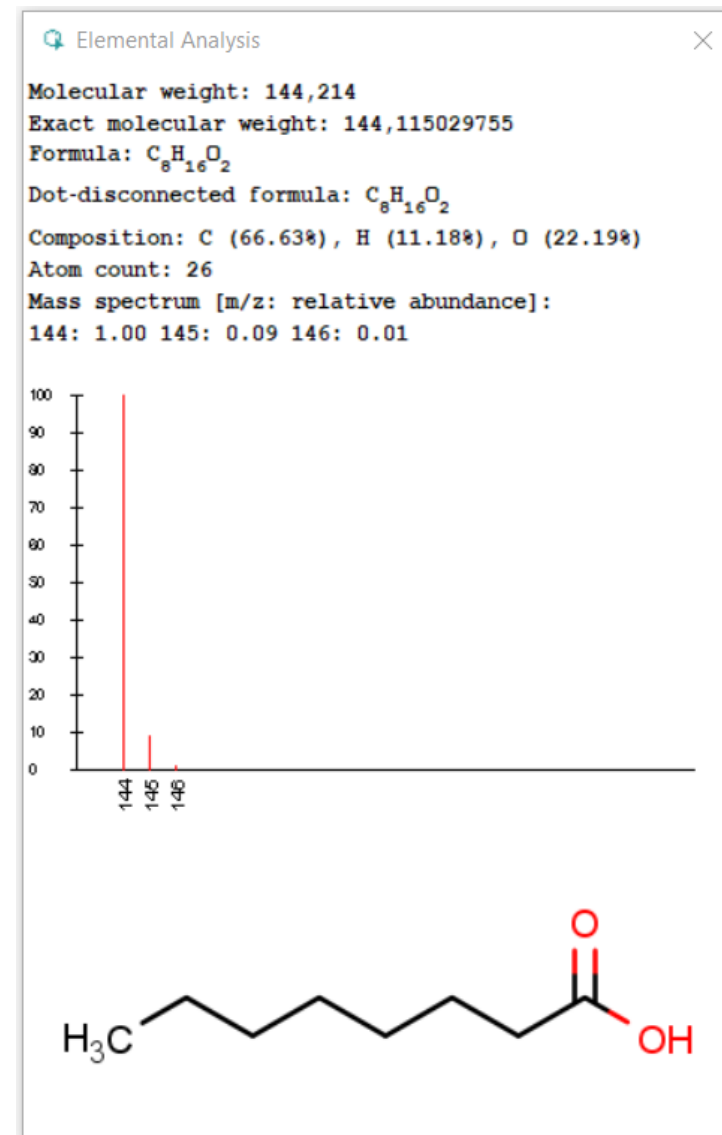
MarvinSketch 18.23

File Edit View Insert Atom Bond Structure Calculations Services Help

Elemental Analysis  
Protonation >  
Partitioning >  
Solubility >  
Charge >  
NMR >  
Isomers >  
Conformation >  
Geometry >  
Other >



CCCCCCCC(=O)O



Esimerkki miten MarvinSketchin  
käyttö voidaan ottaa käyttöön lukion  
kemiankursseilla

# 1.kurssi

- Piirretään vesimolekyyli, siistitään se V-muotoon, merkitään siihen  $\delta+$  ja  $\delta-$ . Kopioidaan vesimolekyyliä ja piirretään vetysidoksia.
- Opetellaan siirtämään ja kääntämään (vesi)molekyyliä.
- Piirretään ioneja ja piirretään ioni-dipolisisidoksia.
- Tutkitaan molekyylin poolisuutta (Charge).

# 2.kurssi

- Opetellaan piirtämään viivakaavaa ja täydellistä kaavaa.
- Opetellaan nimeäminen.
- Opettellaan piirtämään funktionaalisia ryhmiä.
- Piirretään cis- ja transmuotoja ( E- ja Z-toiminto).
- Piirretään yhdisteitä joissa on asymmetrinen hiili ( R- ja S-toiminto).

- Haetaan massaspektri.
- Haetaan Templatesta aminohappoja.
- Marvin Space-tilassa tutkitaan molekyylin tasomaisuutta, mitataan sidoskulmia ja -pituuksia (ctrl+shift+m).

# 3.kurssi

- Piirretään orgaanisia reaktioyhtälöitä
- Piirretään dipeptidejä valmiiden aminohappojen avulla.

# 4.kurssi

- Piirretään polymeerejä.



# 5.kurssi

- Heikkojen happojen ja emästen tasapainoreaktioyhtälöiden kirjoittaminen.

## Lisää MarvinSketch-materiaalia:

Opetusvideoita: <https://peda.net/yhdistykset/maol-ry/koulutus/dmfjk2l/materiaalit/kk>

MarvinSketch-sivusto: <https://peda.net/p/myllyviita/marvinsketch>