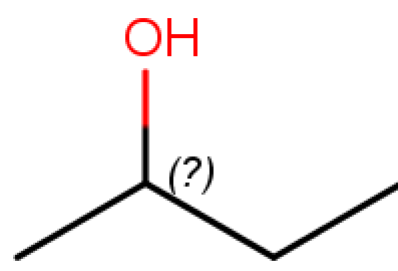
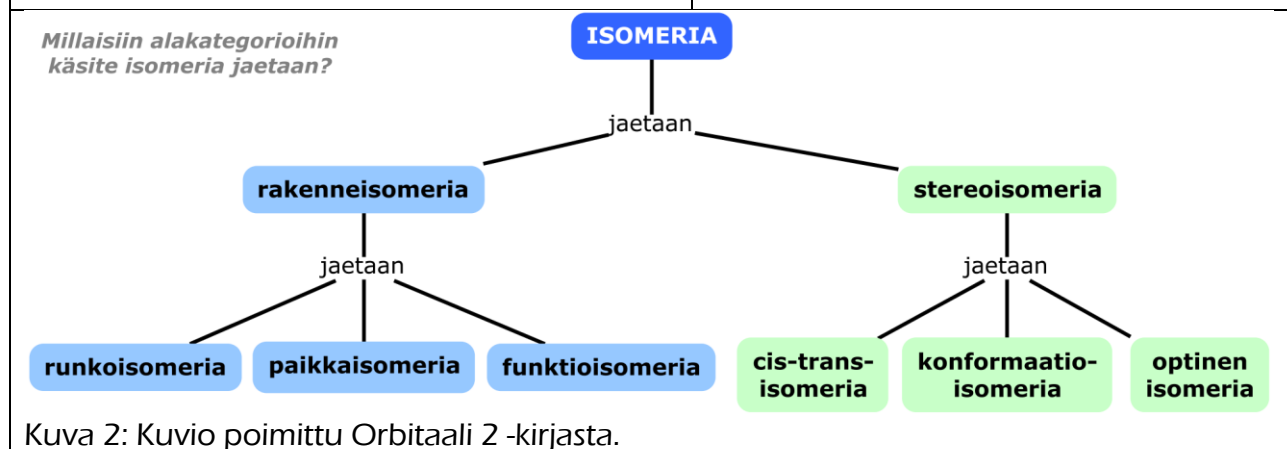


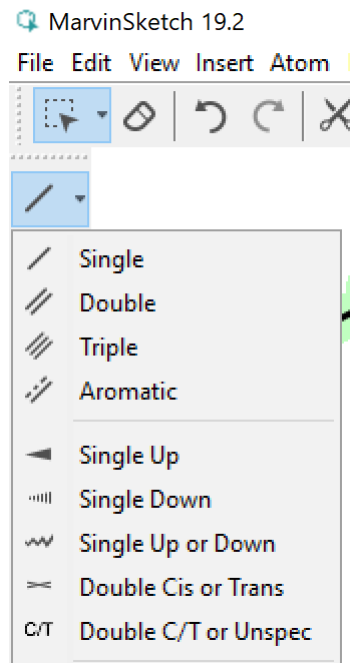
MarvinSketch 3 – Isomeria

8.3.2019

<p>Aineita sanotaan toistensa isomeereiksi, jos niillä on sama molekyylikaava, mutta erilainen rakenne.</p> <p>Kuvassa on 2-butanolin viivakaavaan ilmestynyt kysymysmerkki (mikä ei tule automaattisesti). Tässä siirrytäänkin ohjeen teemaa eli isomeriaan. MarvinSketch auttaa erityisesti stereoisomerian opetuksessa ja tuottamisessa.</p>	<p>Kuva 1.</p> 
---	---



Sidoksien piirtäminen

<p>Erialaisten sidoksien ja cis-trans-isomeriassa esiintyvien kaksoissidosten piirtäminen tapahtuu esim. vasemman reunan painikkeilla. (Kuva 3)</p> <p>Kolme ensimmäistä valintaa kuvaavat perussidoksia (yksikertainen, kaksois- ja kolmoissidos).</p> <p>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).</p>	<p>MarvinSketch 19.2</p> <p>File Edit View Insert Atom I</p> 
---	---

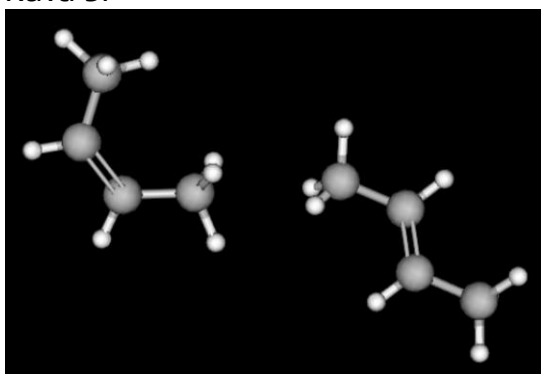
Kuva 3.

cis-trans-isomeria ja E/Z-isomeria

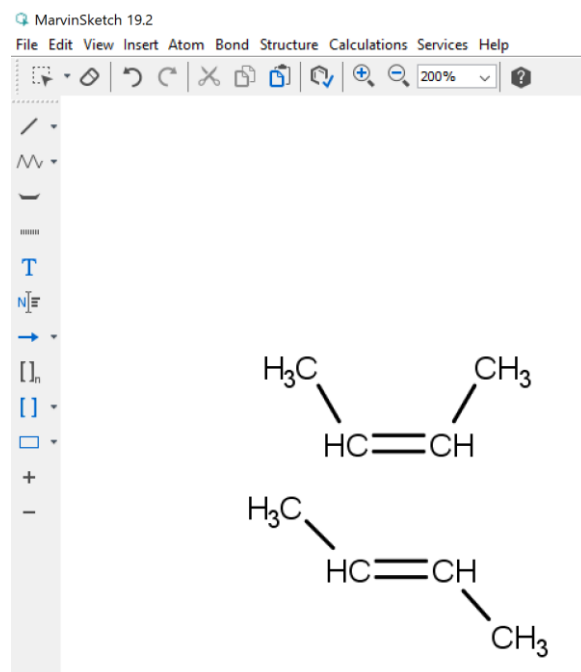
cis-trans-isomeerien piirtäminen perusasetuksilla ja (View | Implicit Hydrogen klikattuna) tuottaa viereisen kuvan mukaiset molekyylit (2-buteeni). Eri isomeerit saadaan tässä piirtämällä (kuva 4)

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.

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 oei 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 hydroksyyli-ryhmä -OH, aminoryhmä NH₂, karboksyyli-ryhmä -COOH ja vety-atomia, mikä ei näy viivakaavassa (kuva 7).

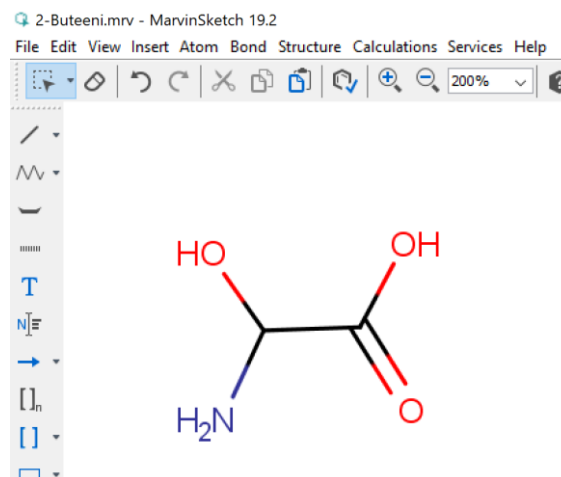
Kuvissa on käytössä siis **viivakaava-oletus** (Edit | Preferences | Carbon Labels | Never ja View | Implicit Hydrogens | On Hetero).

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.

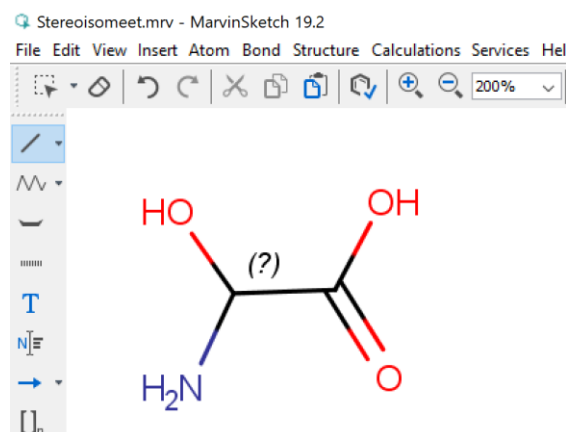
Kuvassa 9 näkyy valinta, jolla saa ensin kysymysmerkin näkyviin: **View | Stereo | R/S Labels | All Possible**. Oletusarvona ohjelmassa on se, ettei se anna tätä tietoa.

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).

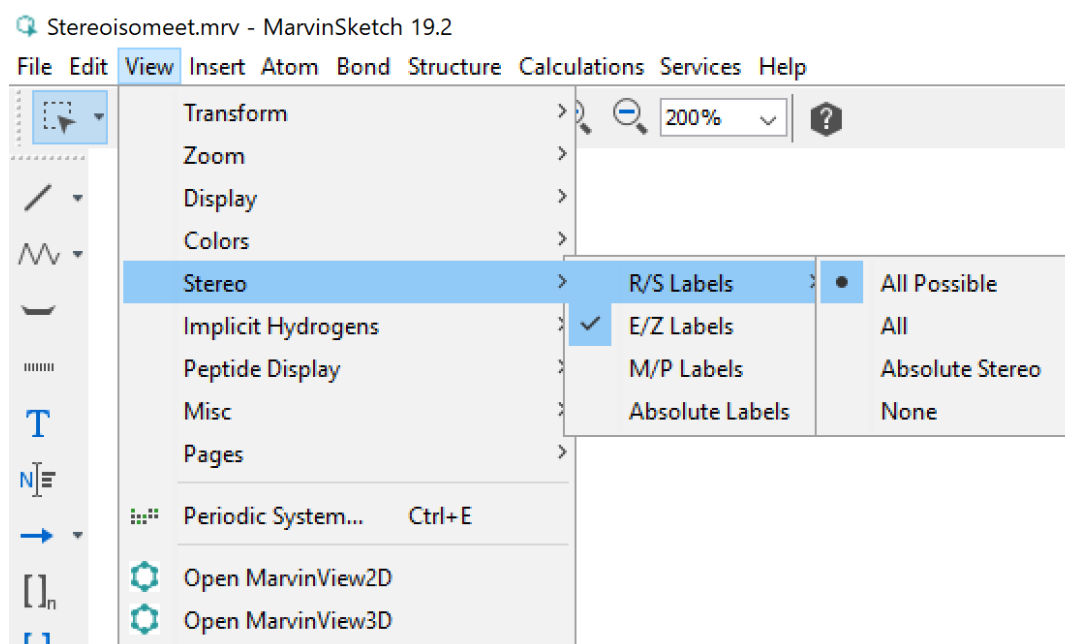
Kuva 7.



Kuva 8.



Kuva 9.



Kuvassa 10 on asymmetrisen hiilen ja hydroksyyliyhmän -OH välisen sidoksen piirretty katkoviivalla (Single Down, kts. 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

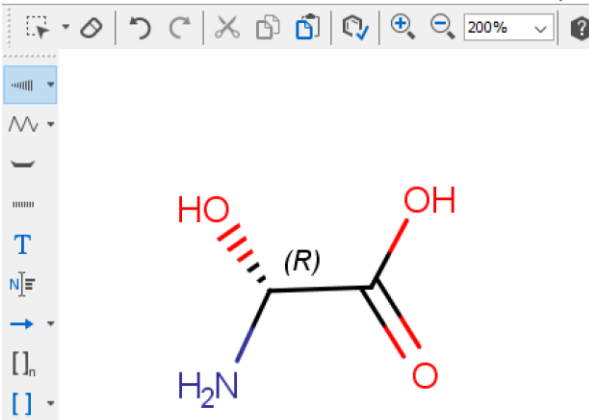
Kuvaan 12 on piirretty molemmat peilikuvaisomeerit ja käytetty kuvan 11 Single Up ja Down -valintoja.

Molekyylin 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

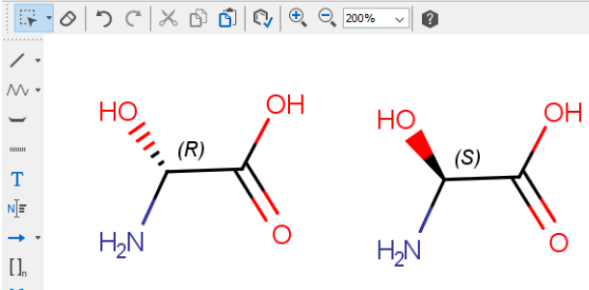
File Edit View Insert Atom Bond Structure Calculations Services Help



Kuva 12.

Stereoisomeet.mrv - MarvinSketch 19.2

File Edit View Insert Atom Bond Structure Calculations Services Help



Kuva 13.

