AEEF

Päivitetty 3.2.2018 MYA

# MarvinSketch

ARI MYLLYVIITA FM

ARI.MYLLYVIITA@HELSINKI.FI

KEMIAN JA MATEMATIIKAN LEHTORI

HELSINGIN YLIOPISTON VIIKIN NORMAALIKOULU

AEEF

https://peda.net/p/myllyviita/marvinsketch

# Sisältö

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

KYSELY:
https://peda.net/p/myllyviita/marvinsketch/tutkimus

AEEF

# MarvinSketch – ohjelman käyttö

ABITTI-TIKUSSA MARVINSKETCH 17.3.27

LADATTAVISSA 18.3.0 (17.29.0 17-SARJAN VIIMEINEN)

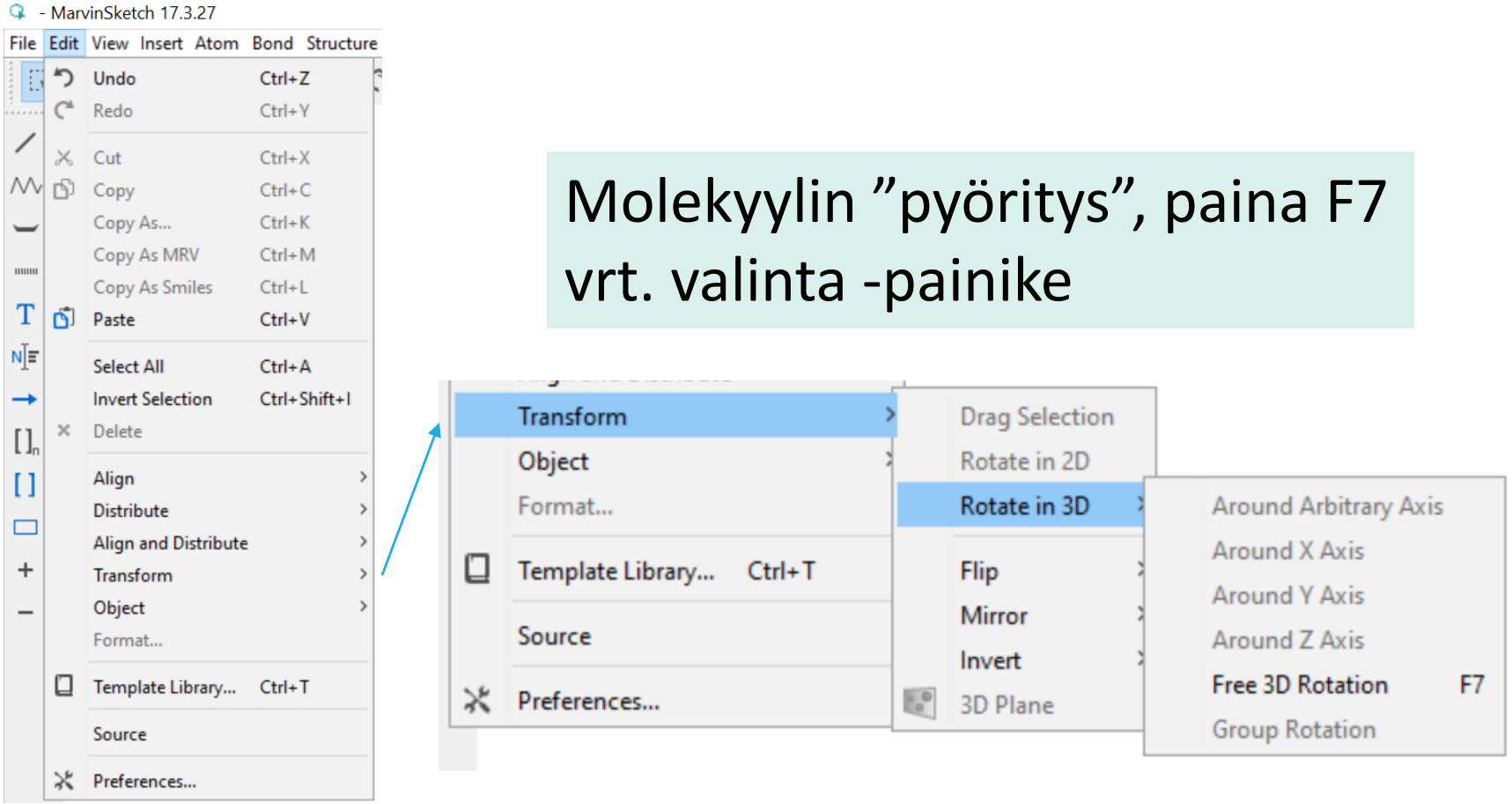
AEEF

# Mihin MarvinSketch ”taipuu”

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

AEEF

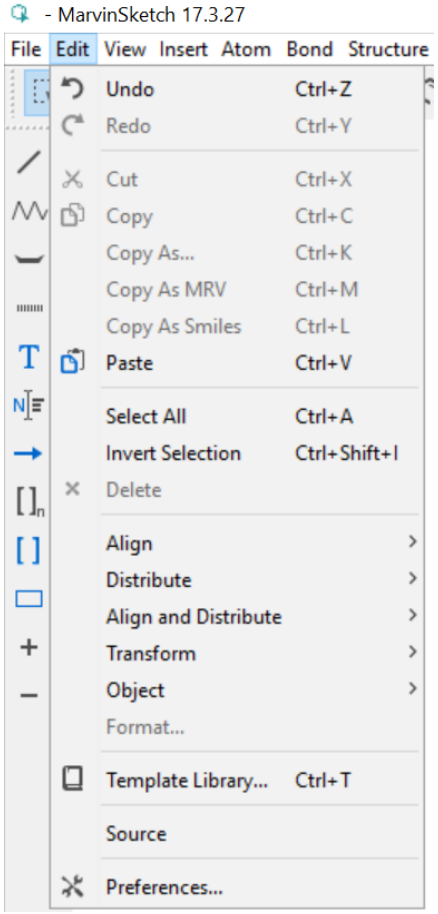
# Valikot - **Edit**

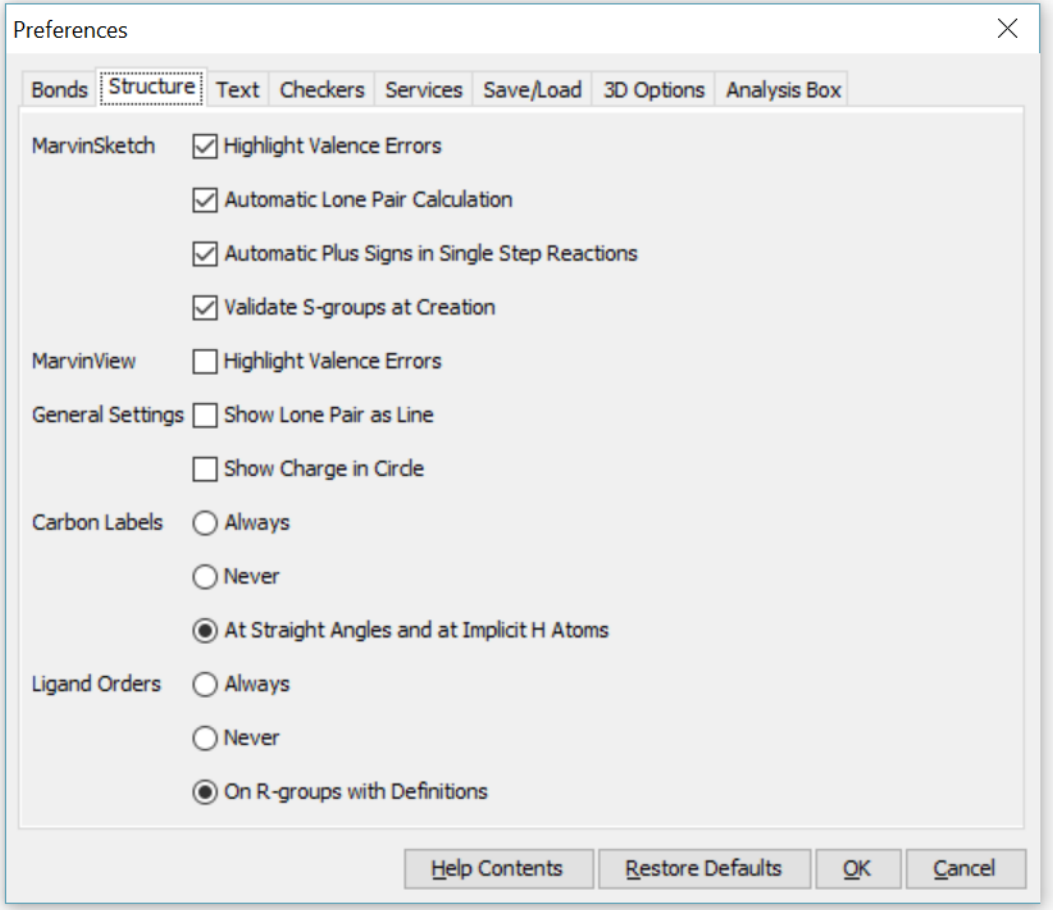



Molekyylin ”pyöritys”, paina F7 vrt. valinta -painike

AEEF

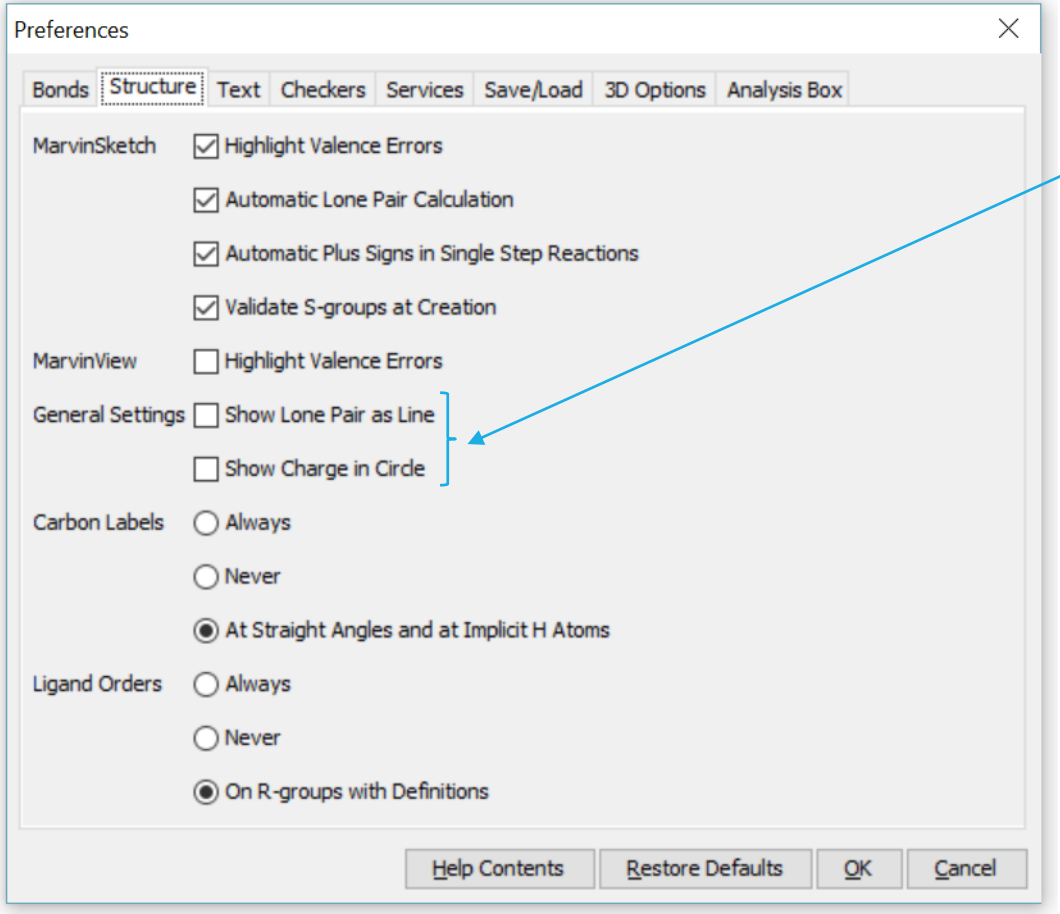
# Valikot – Edit – **Preferences…**



AEEF

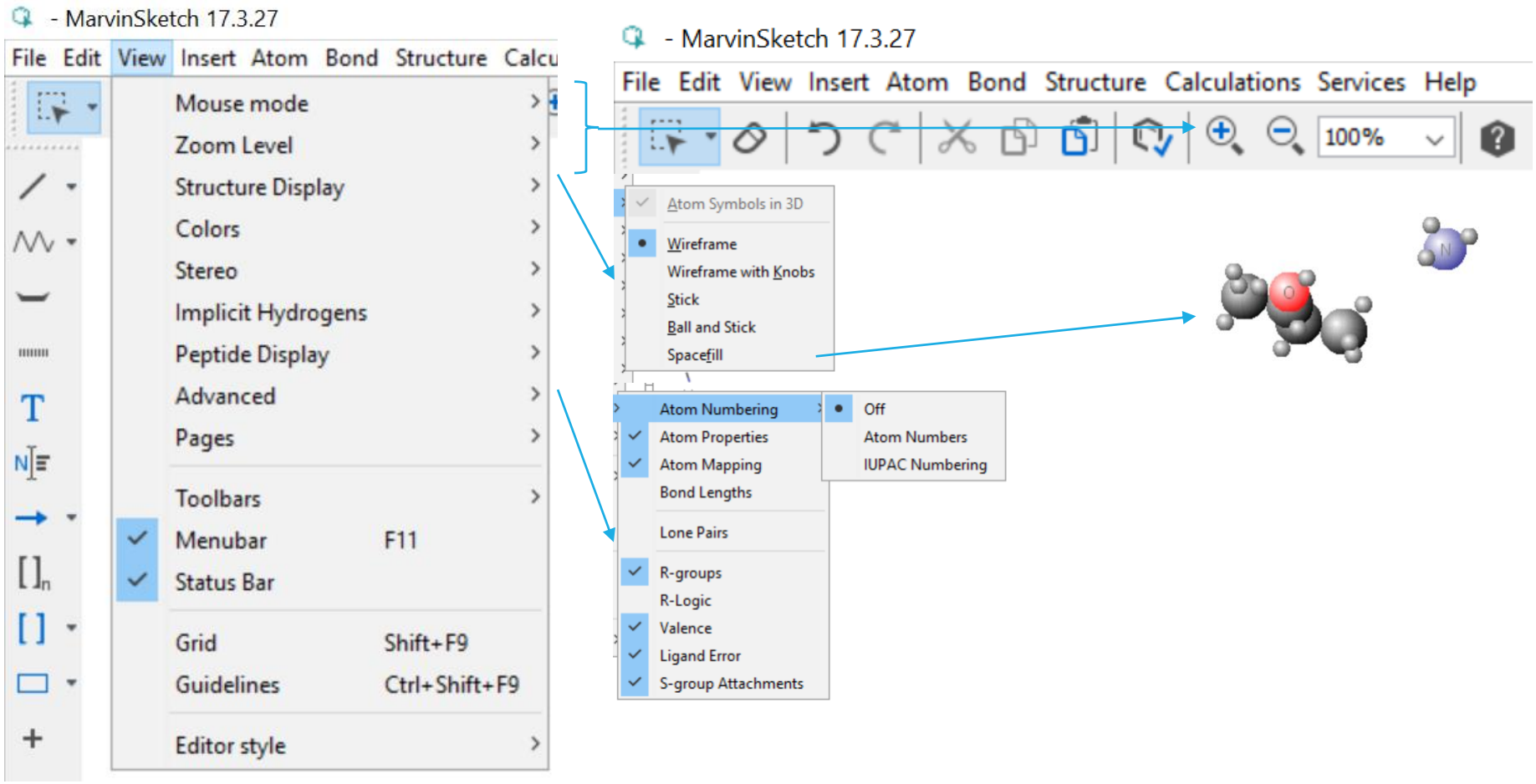
# Vapaat elektroniparit näkyviin




EI TOIMI NORMIOHJELMALLA?

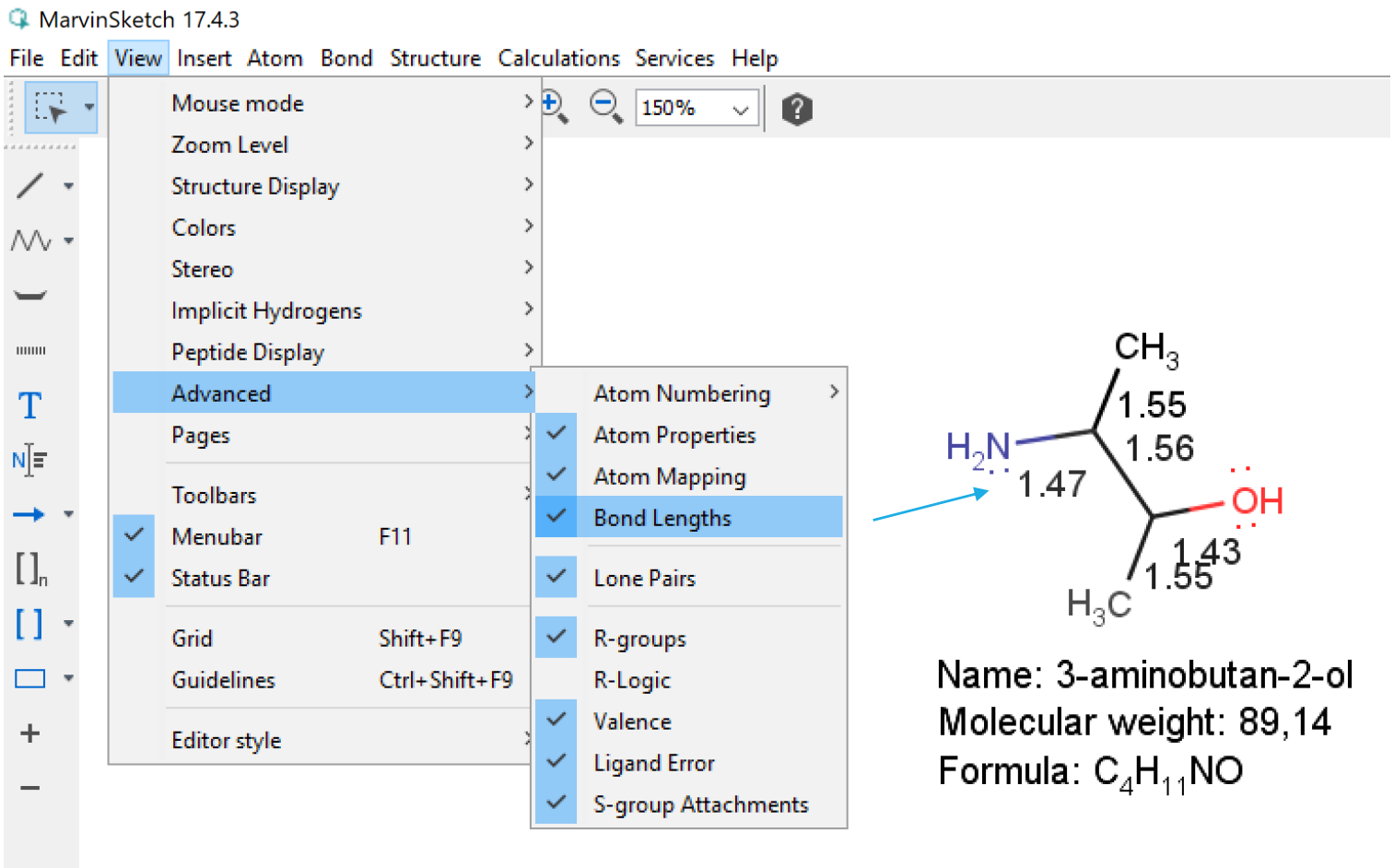
AEEF

# Valikot - **View**



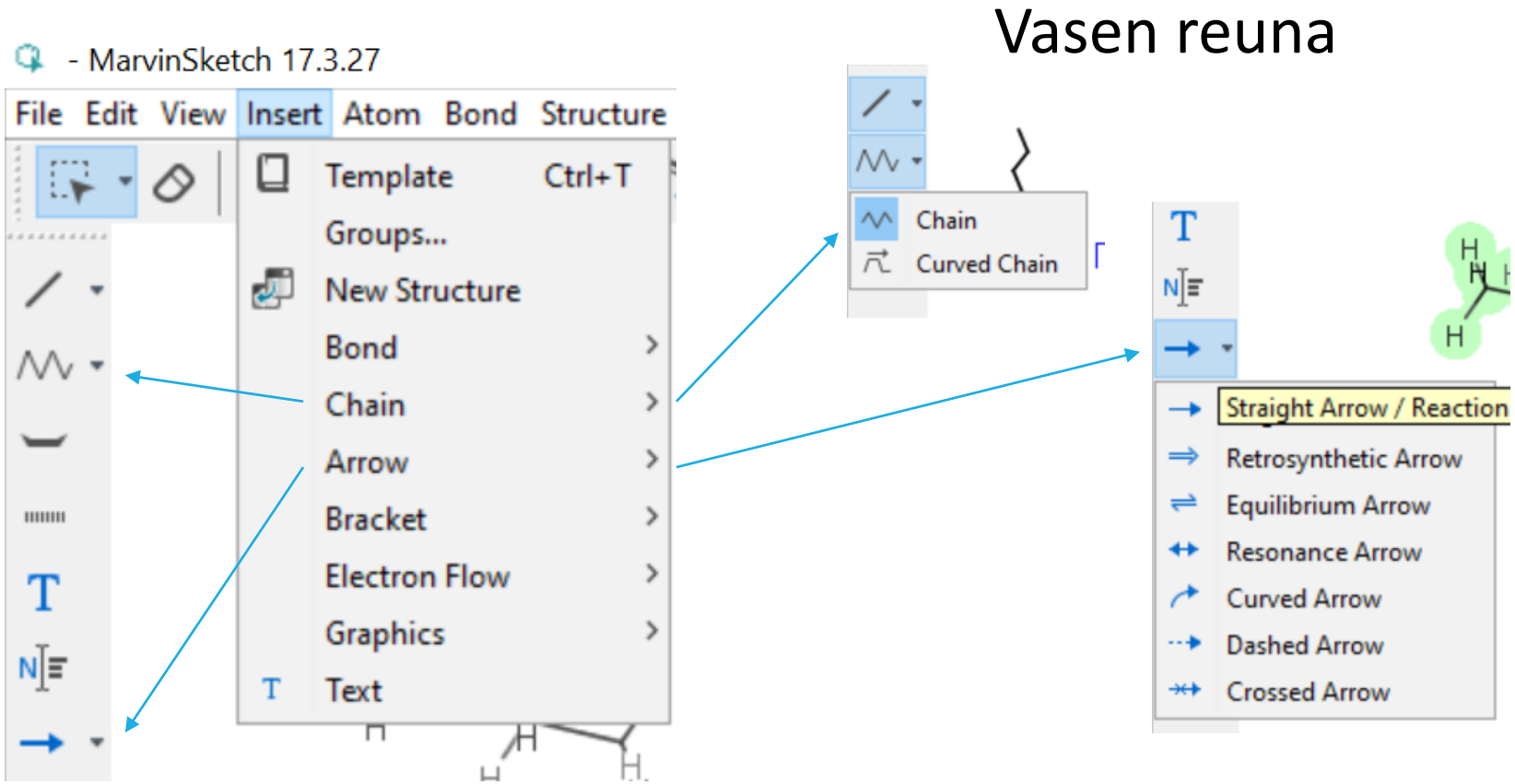
AEEF

# Valikot – **View – Bond Length**



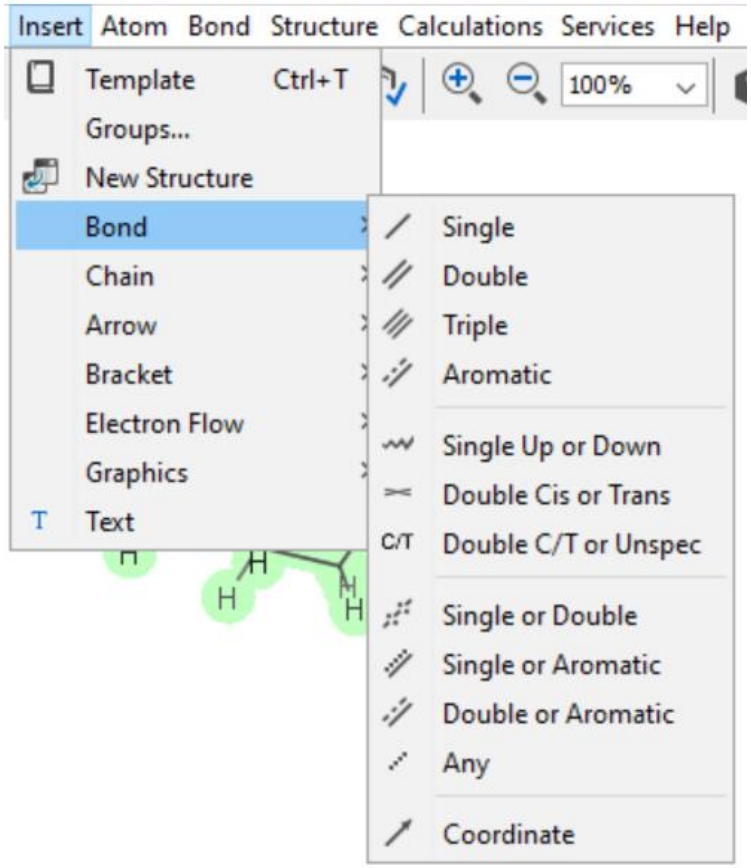
AEEF

# Valikot - **Insert**

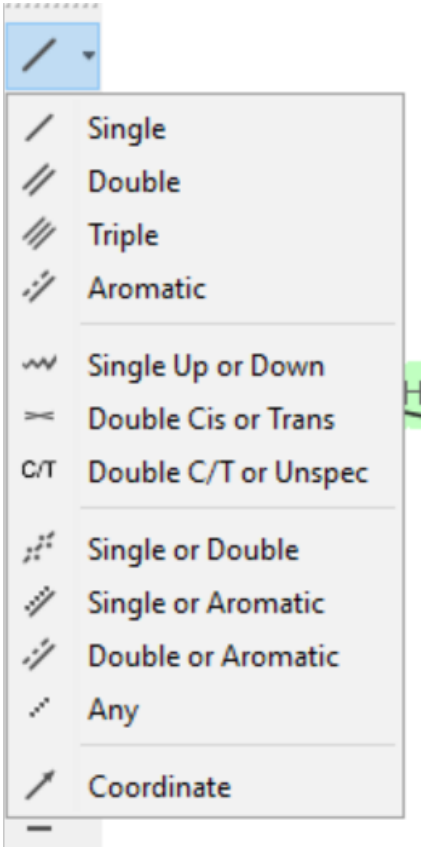


# Bond - Pikavalikosta

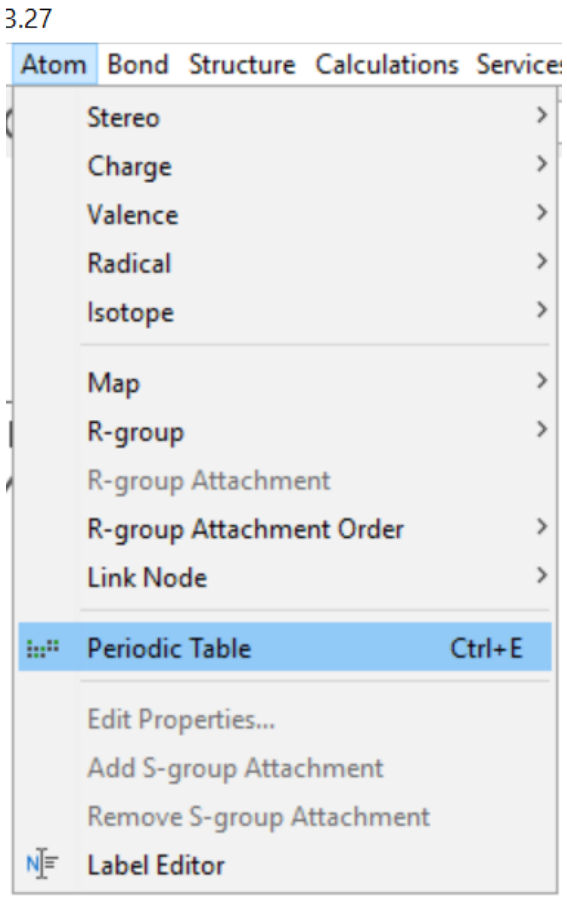
tch 17.3.27




Vasen reuna



# Valikot - **Atom**

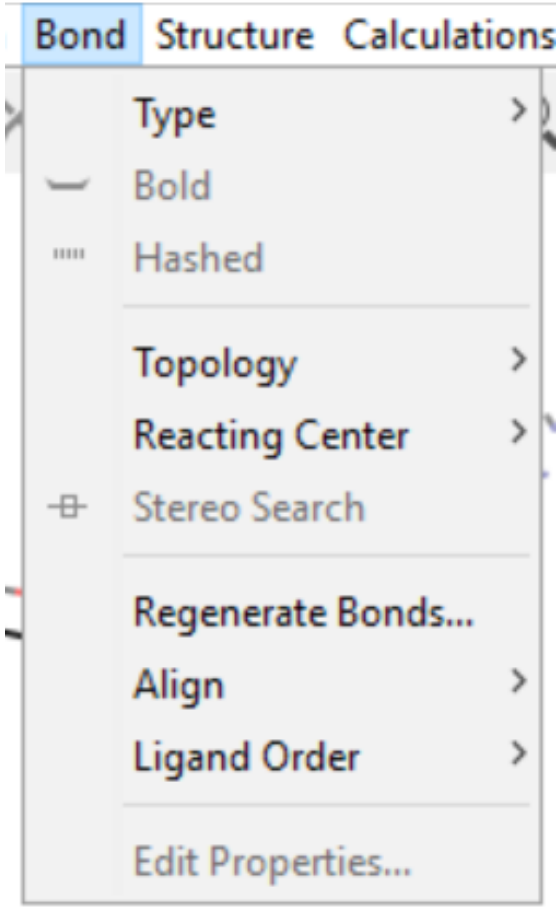



Oikea reuna

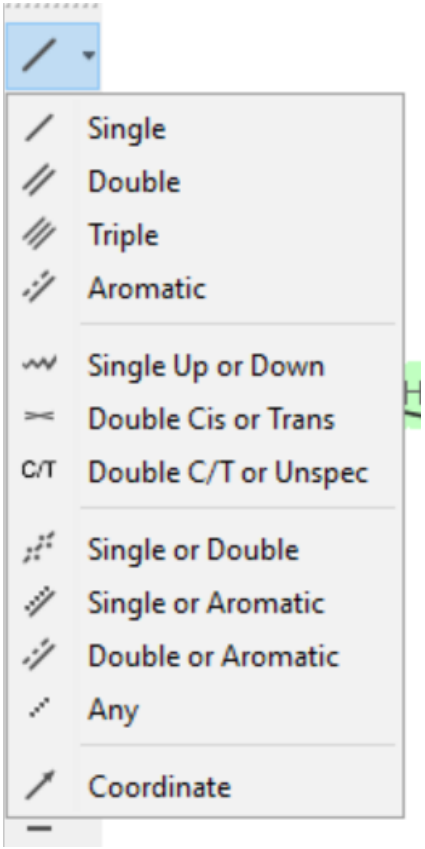

Valitse alkuaine

AEEF

# Valikot - **Bond**

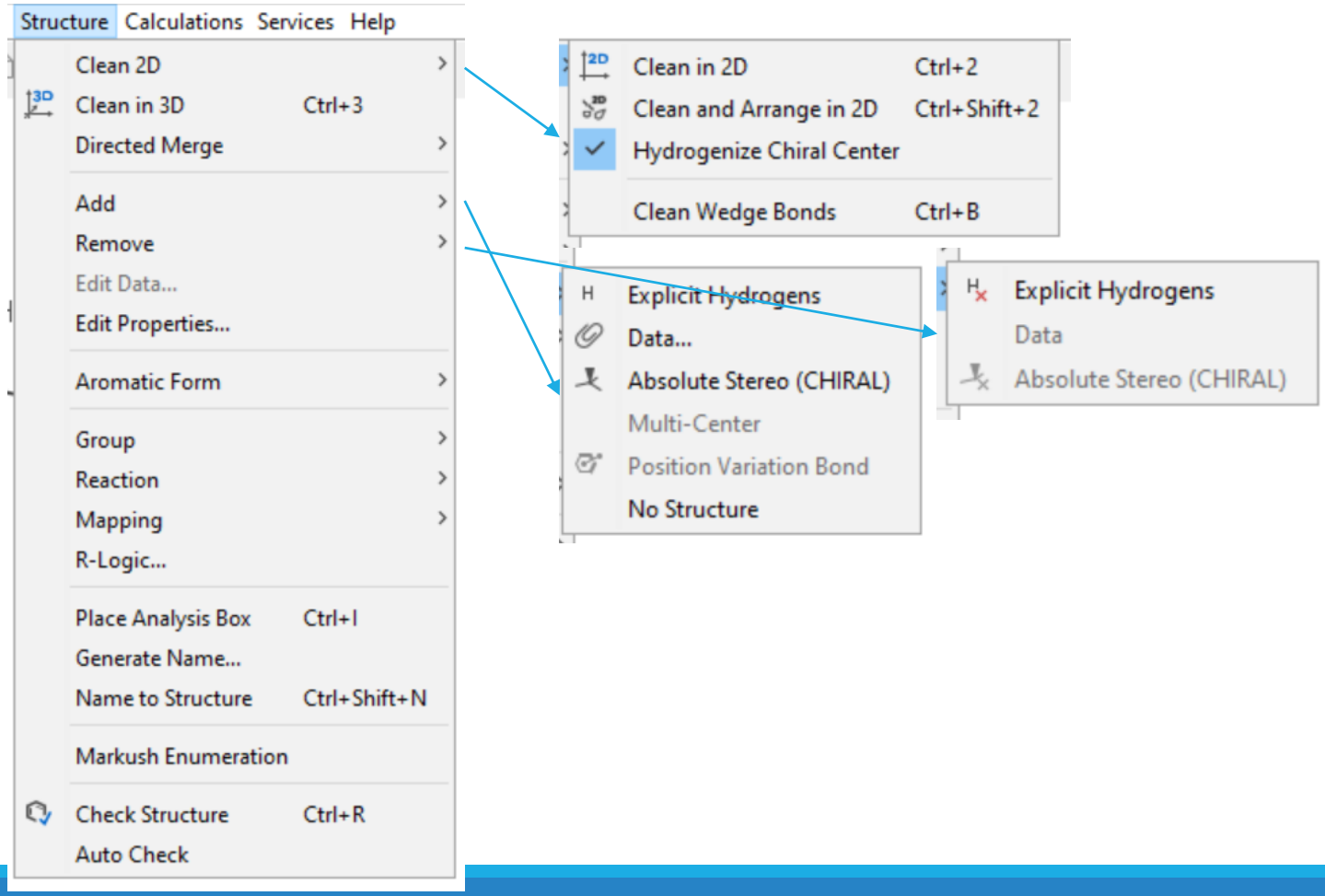



Vasen reuna



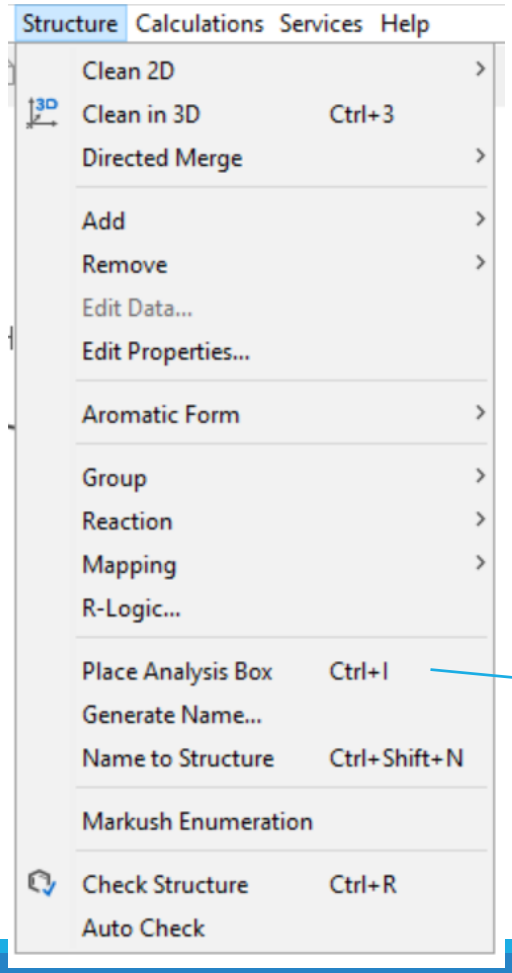
AEEF

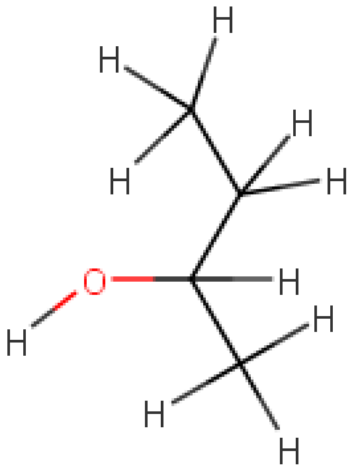
# Valikot – **Structure**



AEEF

# Valikot – **Structure**

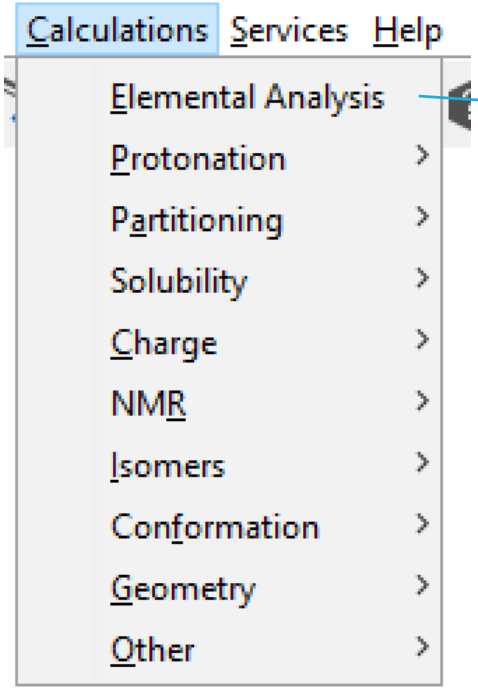


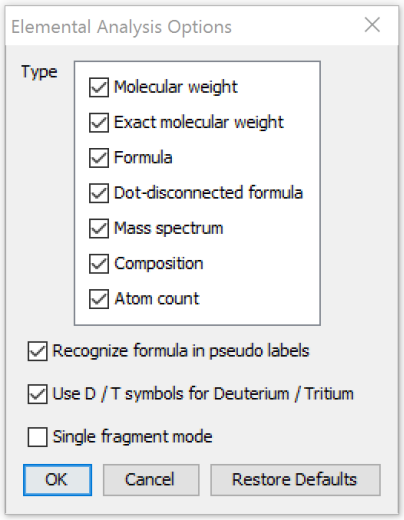



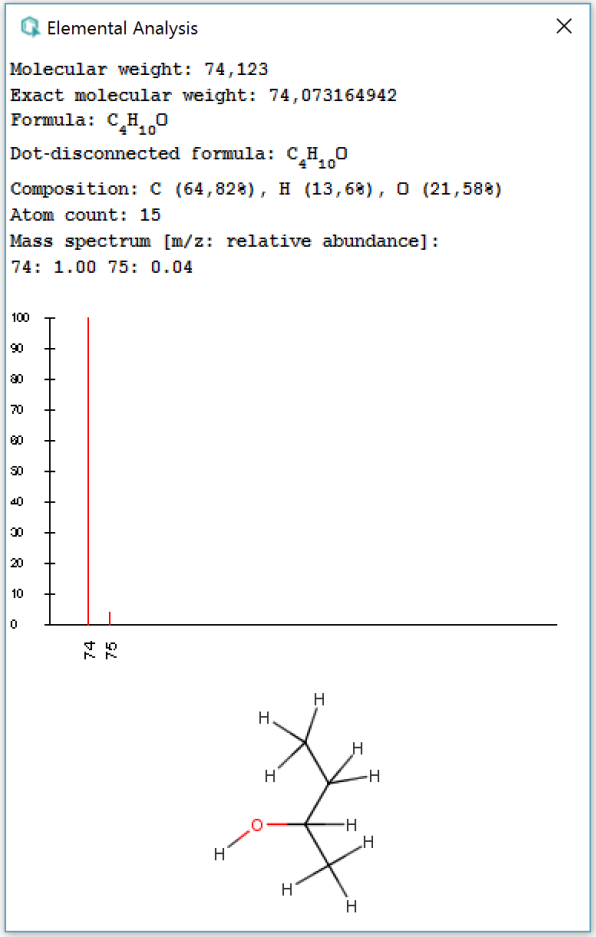

Name: butan-2-ol
Molecular weight: 74,12
Formula: $C_4H_{10}O$

AEEF

# Valikot – Calculations

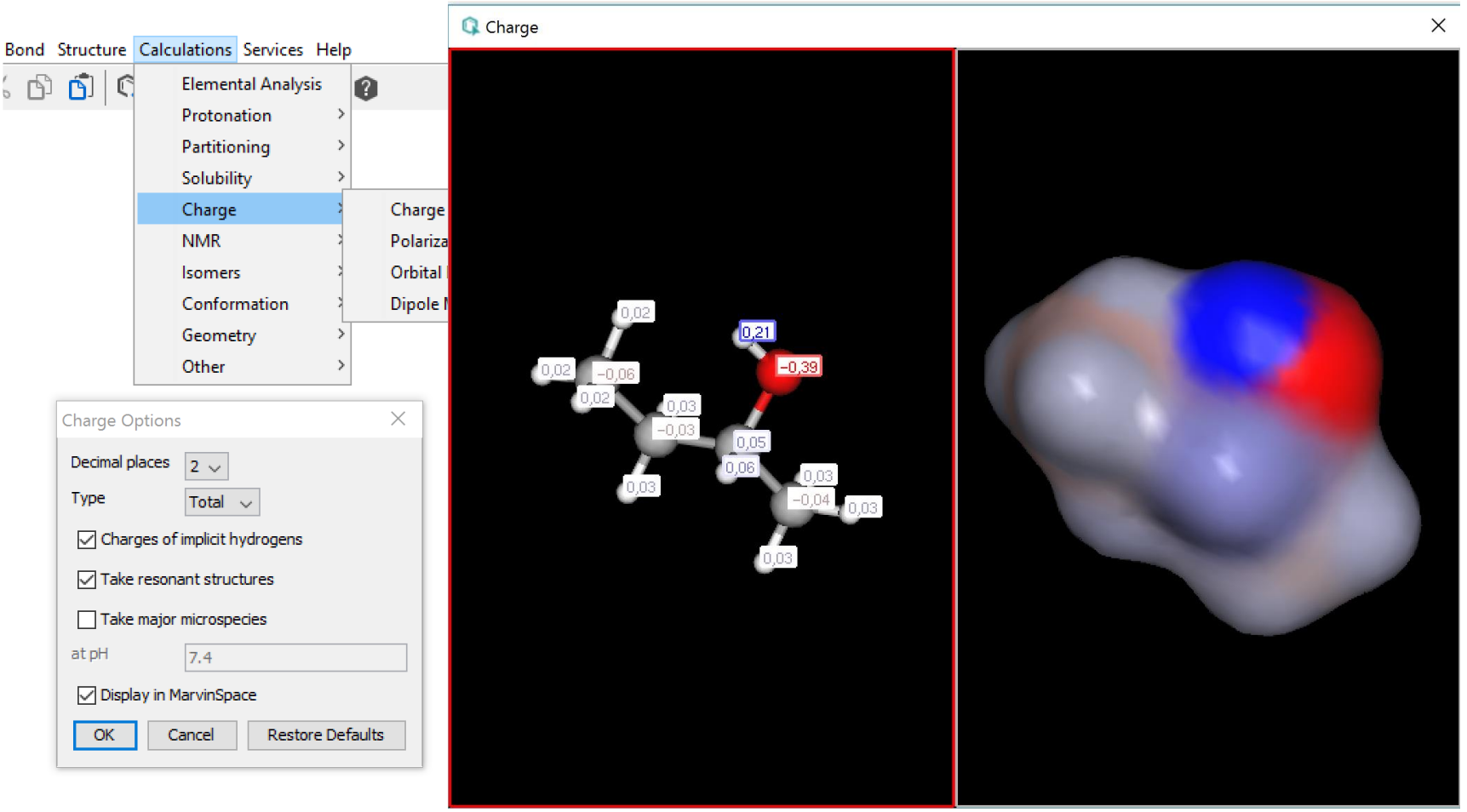


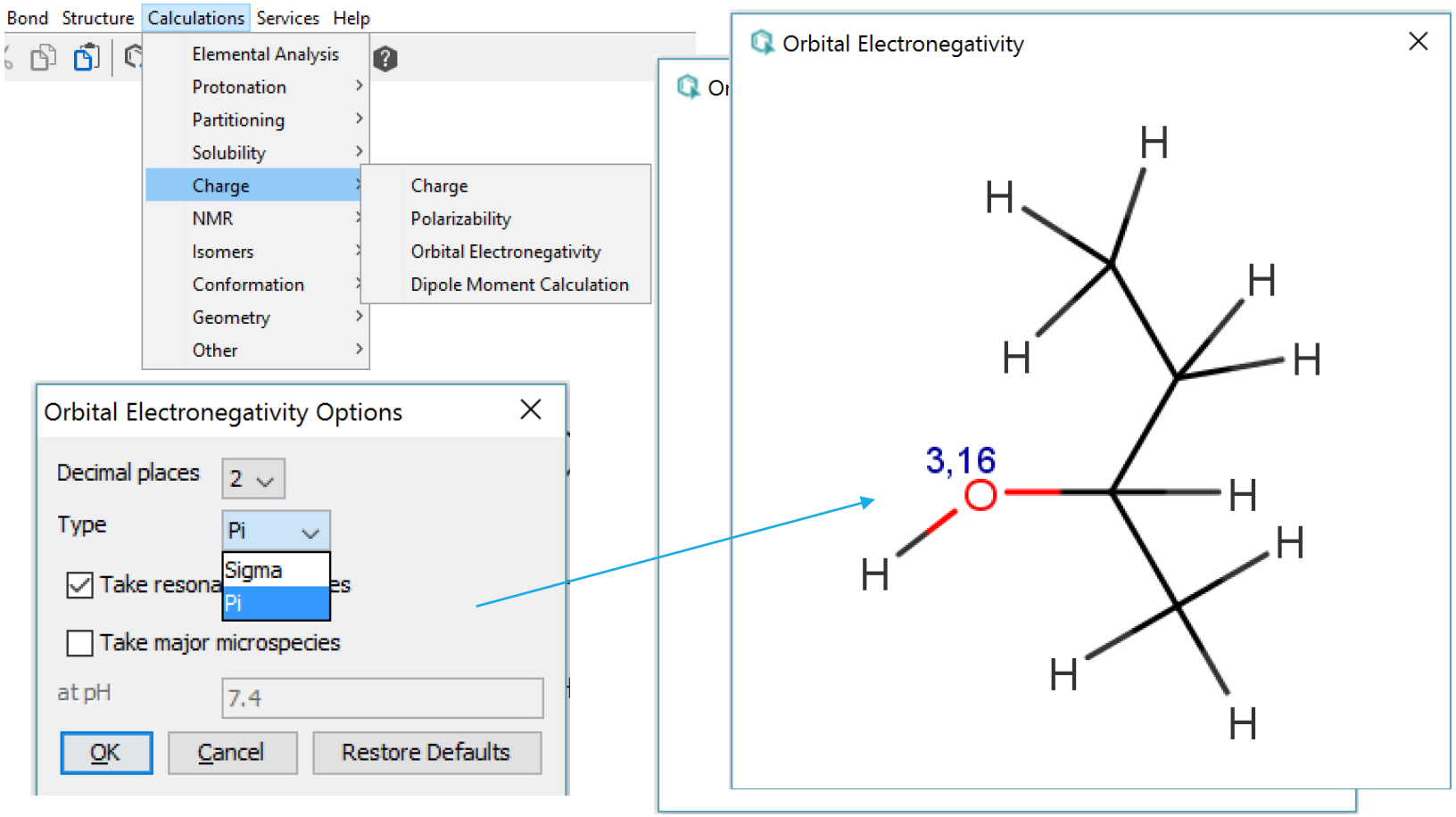
AEEF

# Valikot – Calculations - **Charge**



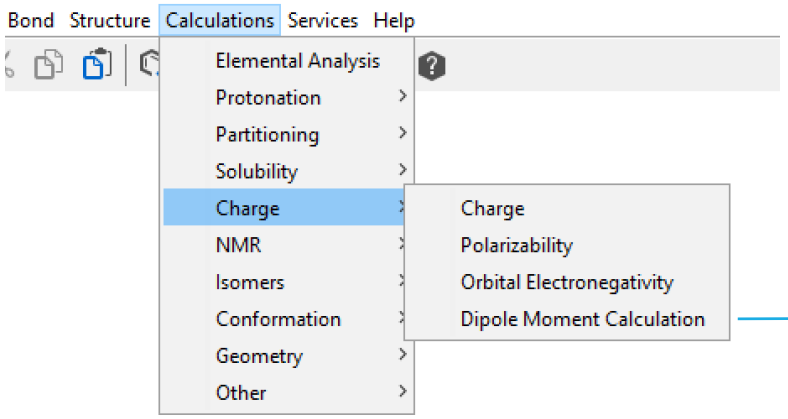
AEEF

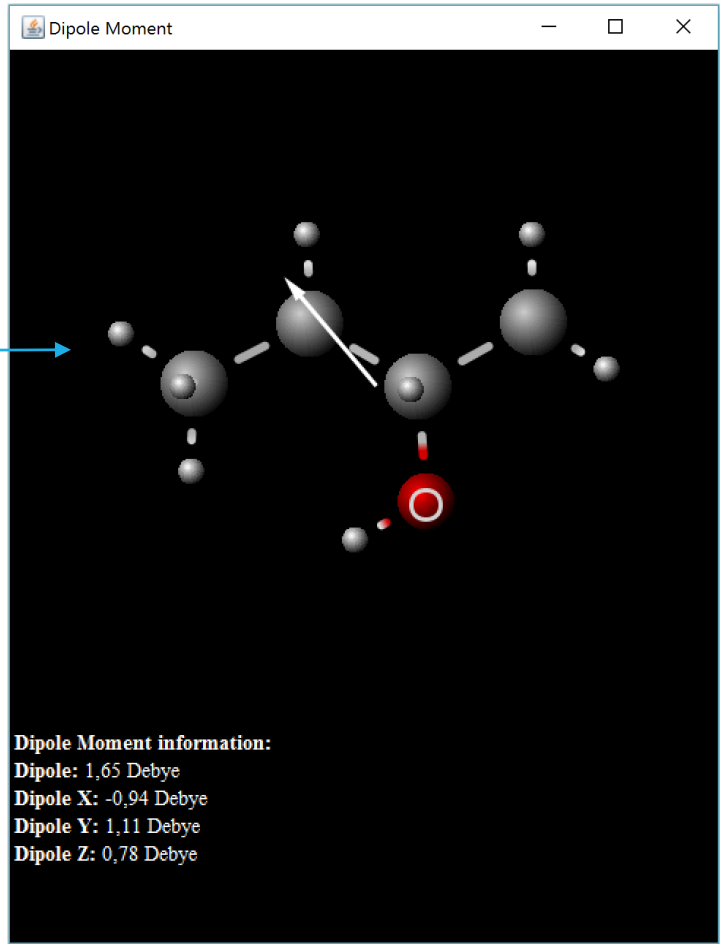
# Valikot – Calculations - **Charge**



AEEF

# Valikot – Calculations - **Charge**

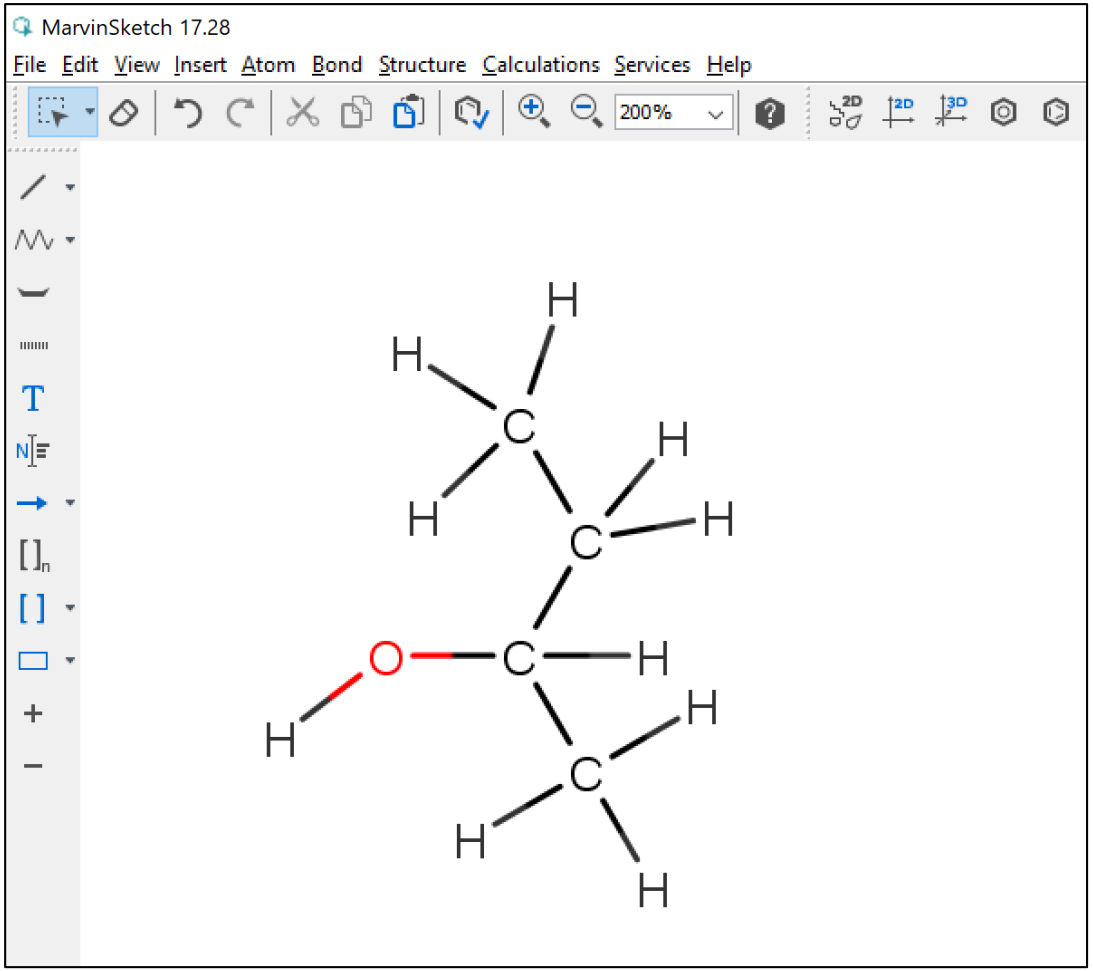


# MarvinSketch

Pedagogisia valintoja?

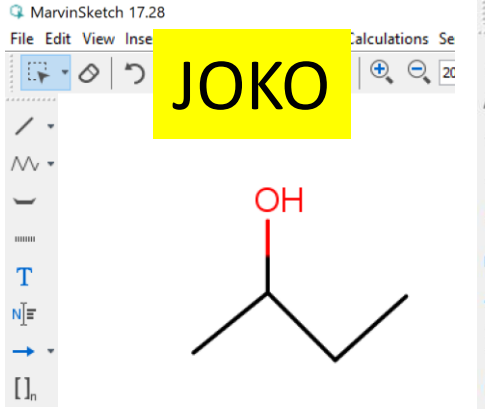
## 1. Viivakaava vai täydellinen rakennekaava?

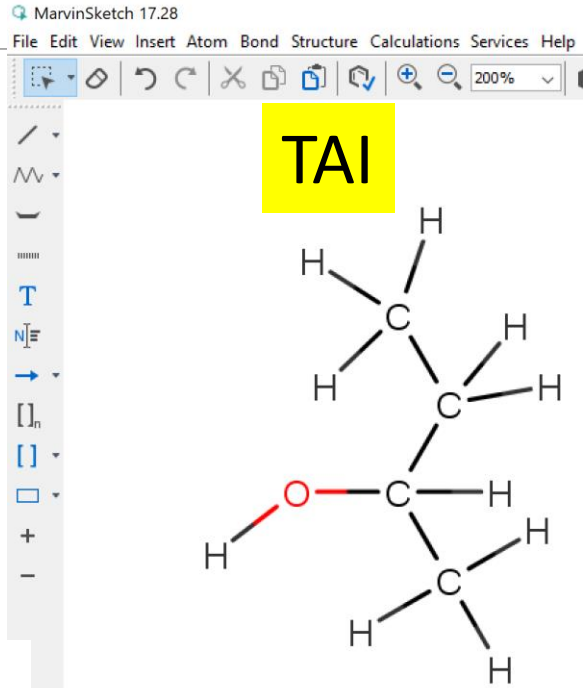


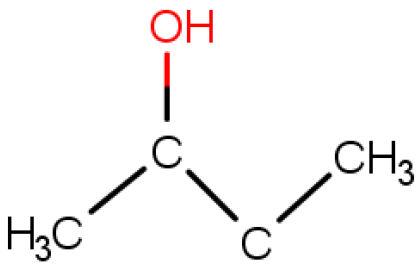
# AEEF Joko viivakaava tai täydellinen rakennekaava?

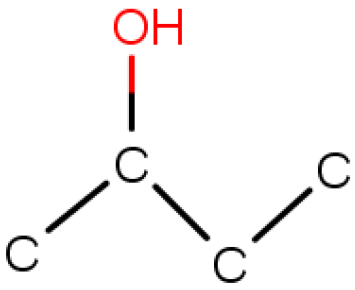
On valittava **joko viivakaava tai (täydellinen) rakennekaava**, kun piirretään orgaanisia molekyylejä!

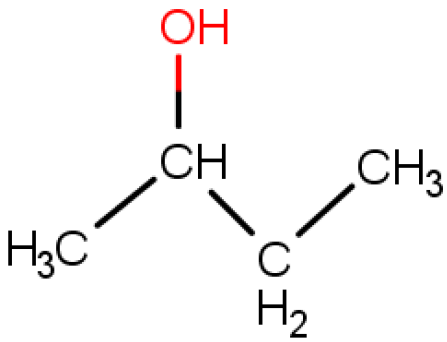
Alla olevat EIVÄT KELPAA!

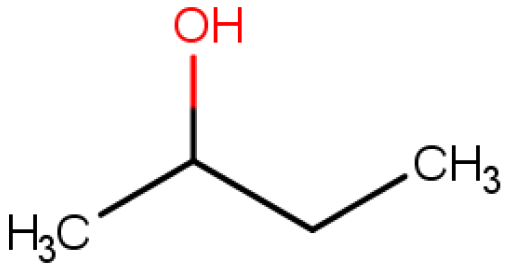


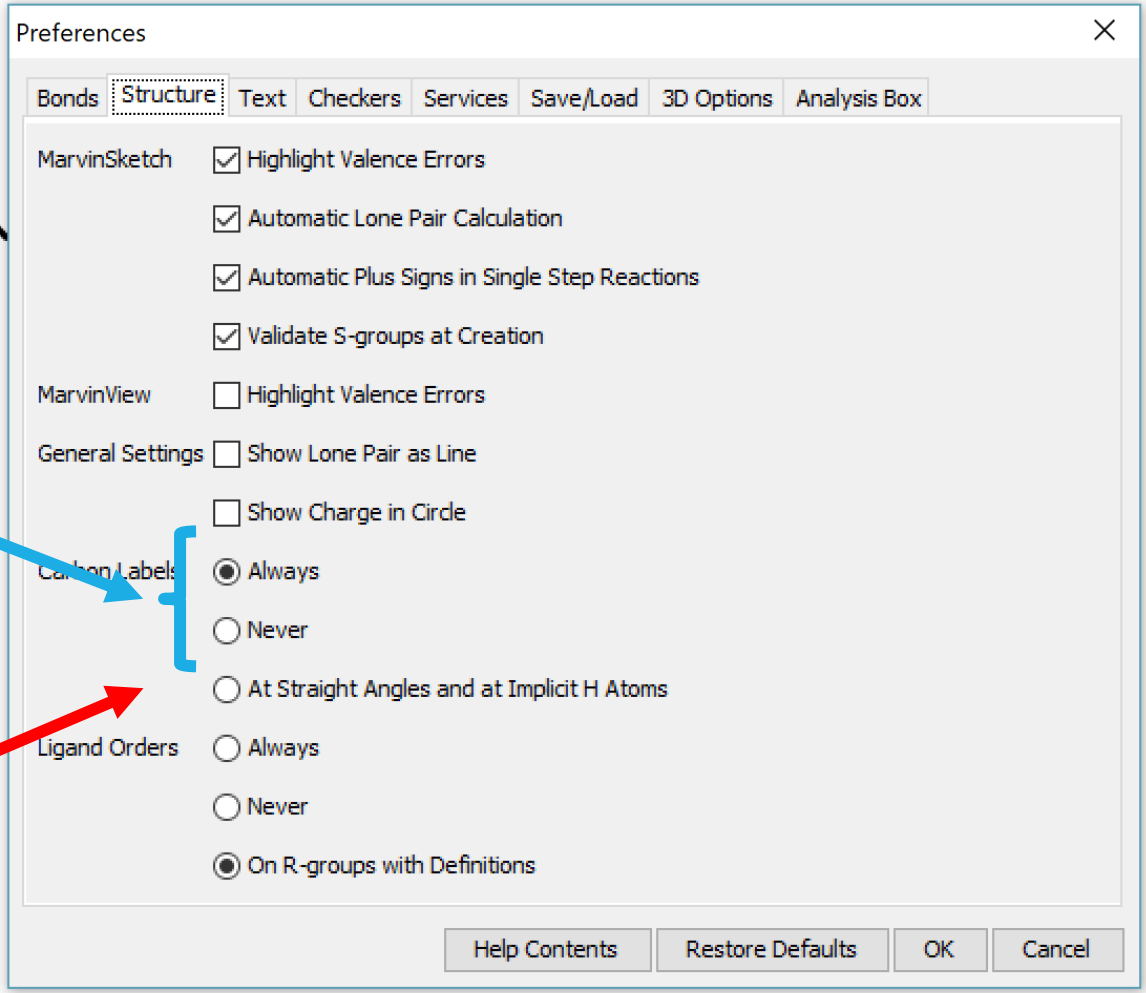



# VAIHE 1: Hiilet näkeviin tai ei?

VAIHE1: Viivakaava tai täydellinen rakennekaava

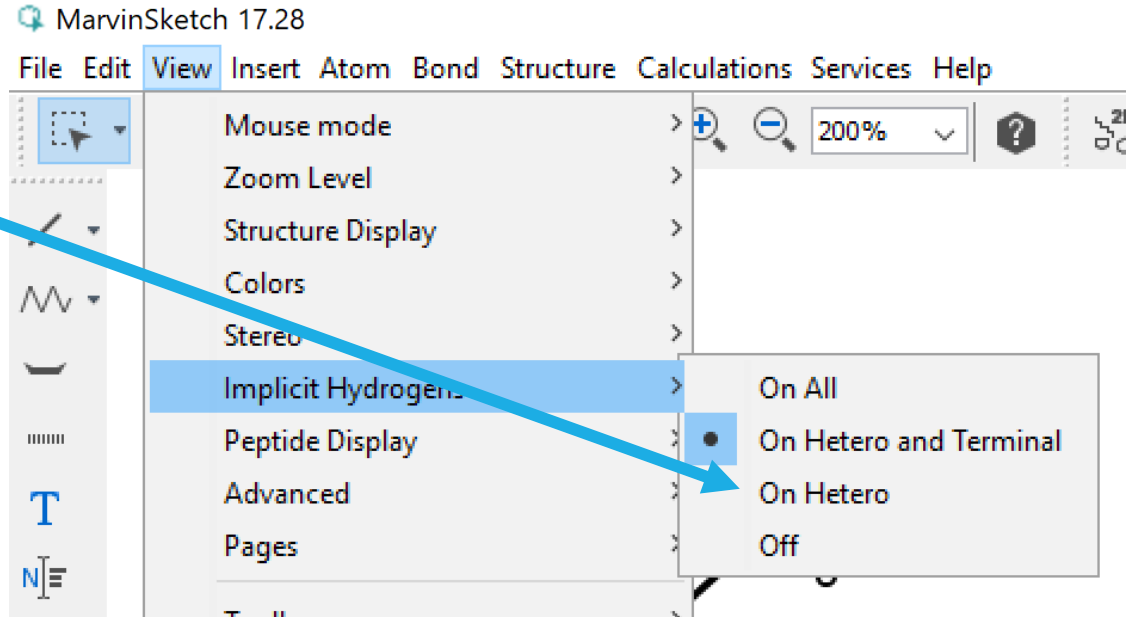
Valitaan se, **näytetäänkö hiilet lainkaan tai kaikki** (ei muita vaihtoehtoja käytetä!!!)

EI TÄTÄ



# VAIHE 2: ”Implisiittiset vedyt”pois

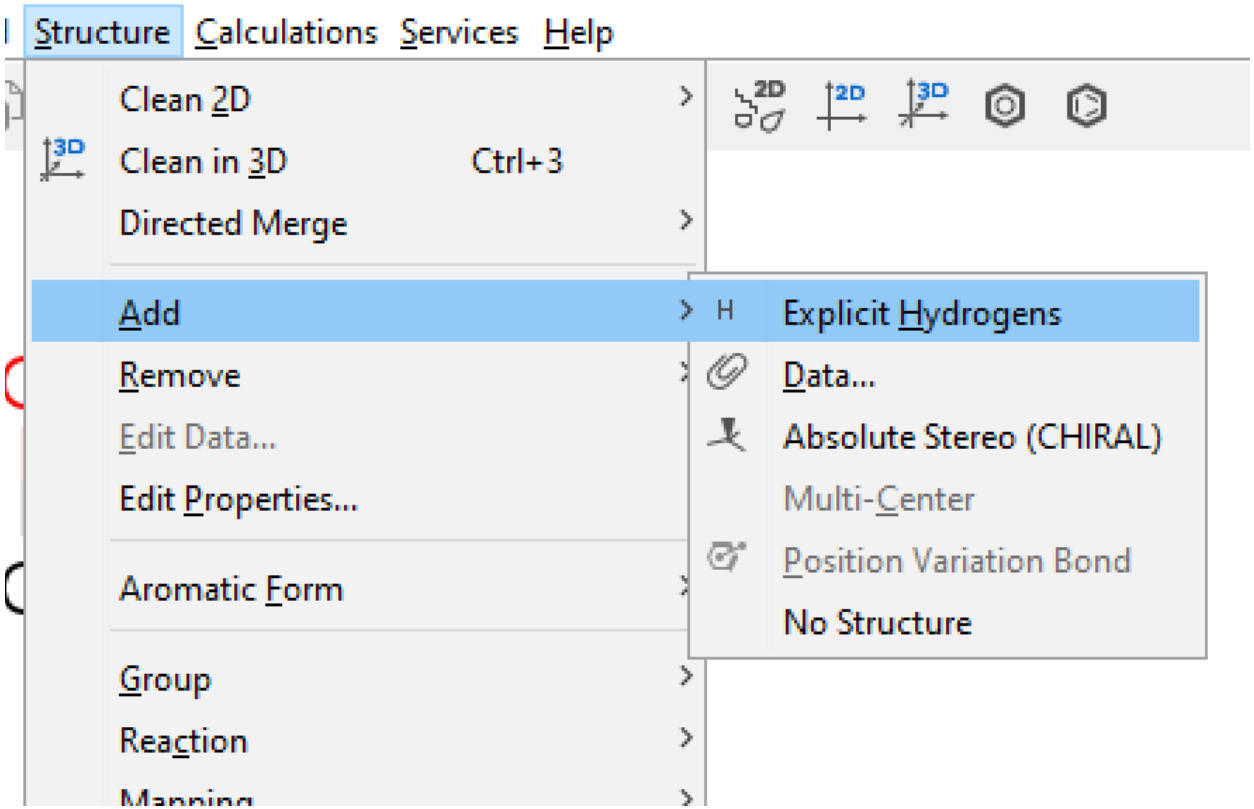
Varmistetaan vetyjen näkyminen **vain** ”**heteroatomien**” yhteydessä (**funktionaalinen ryhmä**).



# Vaihe 3: Jos täydellinen rakennekaava →

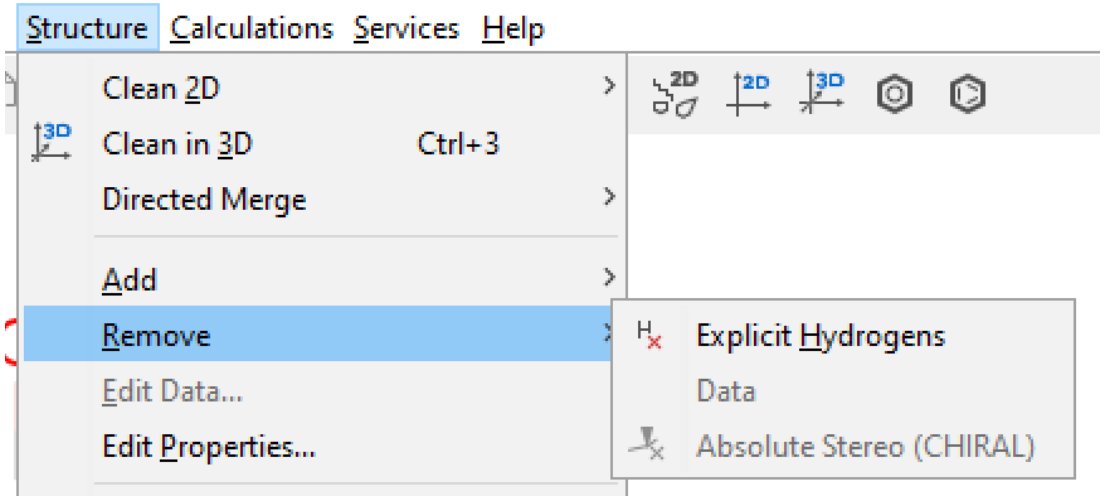
**Täydelliseen rakennekaavaan** valitaan ”Carbon labels” ALWAYS (Preferences -kohdasta). JA

Structure-kohdasta **Add Explicit Hydrogens**



# Paluu viivakaavaan?

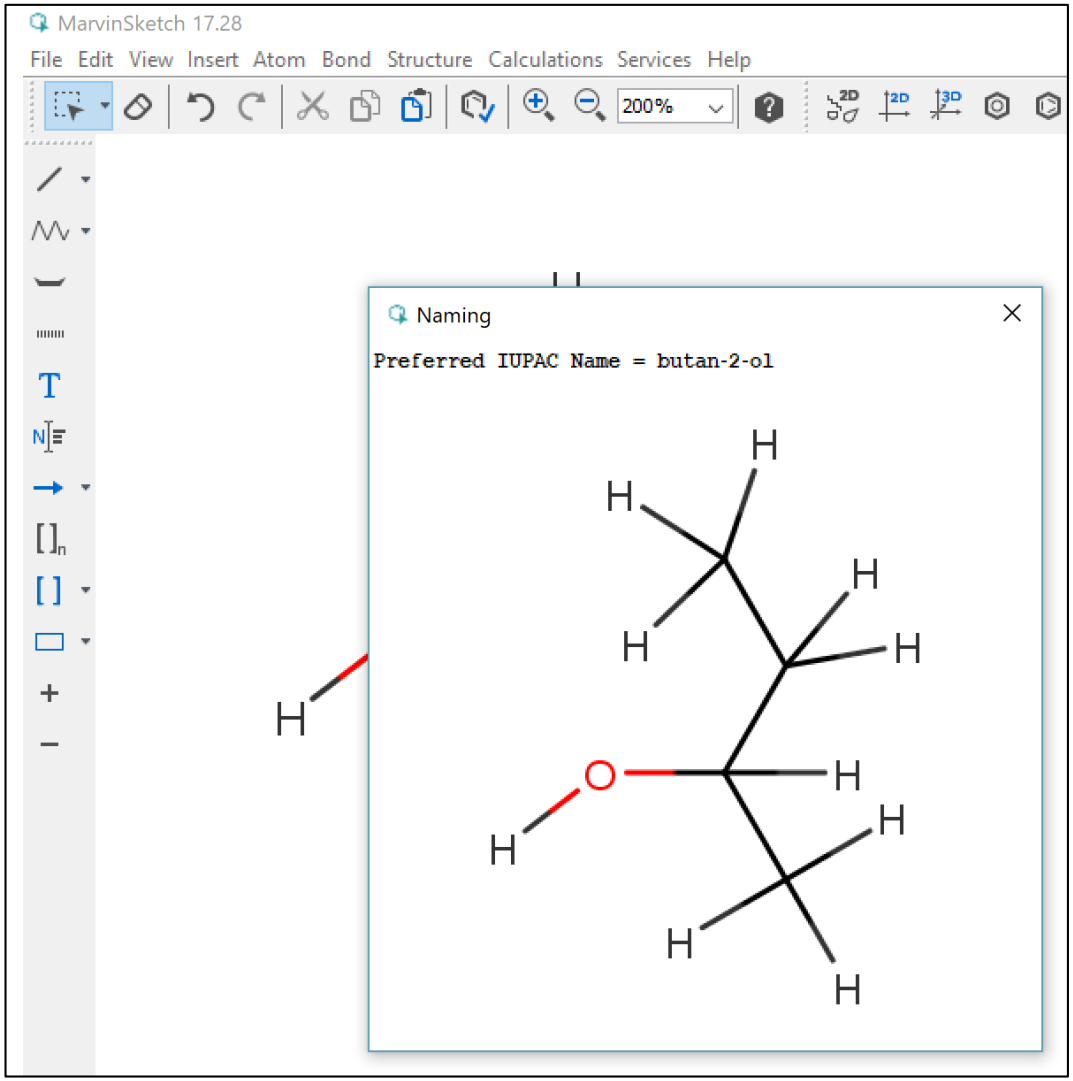
Jos haluaa palata viivakaava-esitysmuotoon. Poistetaan vedyt (viereinen kuva) ja poistetaan hiiliatomien merkinnät (Preferences –osiosta Carbon labels → Never)



# MarvinSketch

Pedagogisia valintoja?

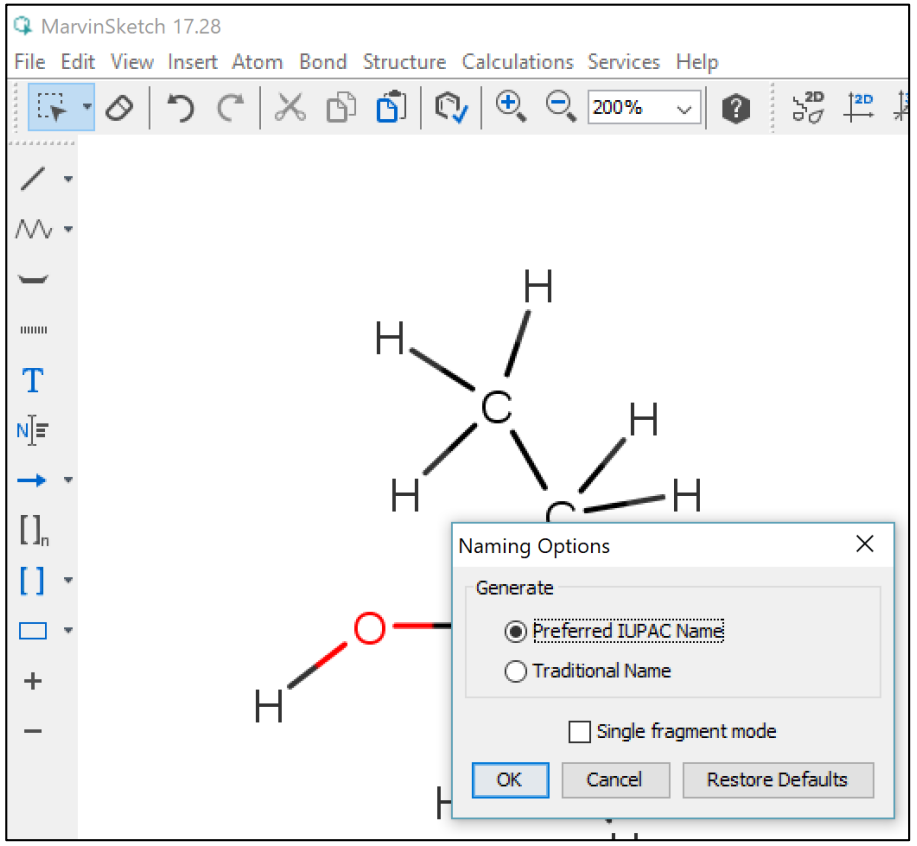
## 2. Nimeämisen opetus



# MarvinSketch nimeää molekyylit (myös Abitti-versiossa)

Miten kurssilla opetetaan orgaanisten molekyylien nimeäminen? Miksi?

MarvinSketch tuottaa nimet ja toisinpäin – nimestä rakenteen.



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