



MOLEKYYLIMALLINNUS- TYOPAJA

MAOL ry:n syyspäivät
Turku 7.10.2017

FT Johannes Perna
Yliopistonlehtori, Kemian laitos



KESKITYTÄÄN MARVINSKETCHIIN

- MarvinSketch on yo-kirjoituksissa
 - Emme saaneet asennetuksi MarvinSketch-ohjelmistoa MAOL-päiville
 - Marvin JS on JavaScript pohjainen eli toimii verkkoselaimessa ilman asennusta
- Harjoitellaan mahdollisuuksia tällä asetelmalla
 - Googleen hakufraasi: "Marvin JS"
- **EDIT:** Ei ATK-luokkaa, opettajilla oli mukana koneet, jossa ohjelmisto asennettu. **Bra!**





TAIDOT

1. Rakenteiden piirtäminen ja generointi
2. Rakenteiden siirtäminen, pyörittäminen, zoomaus
3. **EDIT: Marvin Space**
 1. Display-valikko → Erilaiset esitystavat
4. Calculations (demo)
 1. Elemental analysis
 2. Naming (IUPAC – traditional)
 3. Charge > Charge (Ei Abitissa)



TEHTÄVÄESIMERKIT

1. Rakenteiden piirtäminen
 - Viedään LibreOfficeen
2. Kiraalisuus
 - Generoidaan rakenne
3. Reaktioyhtälön piirtäminen
 - Kotona



EDIT: LATAAMINEN (1)

- Digabi-sivuilla oleva linkki:
<https://www.chemaxon.com/products/marvin/marvinsketch/>

1. Klikkaa violettia painiketta
2. Hyväksy termit



Download Marvin Suite

Accept the Terms of Usage

| Accept the License Agreement. ([Read EULA](#) // [Upcoming changes in EULA](#))



EDIT: LATAAMINEN (2)

- Ei tarvinnut kirjautua sisälle
- Valitse oikea versio ja lataa.
- Asenna tuplaklikkaamalla.

- Ohjelmisto vaatii myös oikean JRE:n asennusta. [Latauslinkki.](#)
 - JRE = Java Runtime Environment

Version 17.24.0

DESKTOP APPLICATIONS, API, SIGNED JARS AND EXAMPLES

SELECT PLATFORM:

Windows [.exe]

Macintosh [.dmg]

Linux

Marvin archive [.zip]

Valitse ja lataa

WINDOWS (.EXE) FILES:

Installer [.exe] 32 bit

Installer [.exe] 64 bit

Installer with OLE Support [.exe] 32 bit

i WINDOWS (.EXE) INSTALLER (.EXE) 64 BIT

Includes Marvin desktop applications, API, examples, documentation.

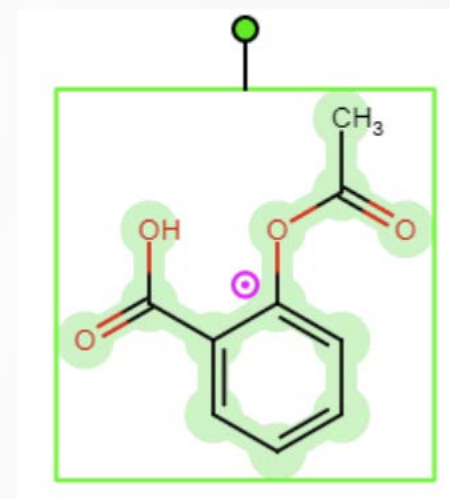
Requires installed 64 bit Java.

Download Marvin



1+2. RAKENTEET JA NIIDEN LIKUTTELU

- Piirtäminen
- Generoi nimellä (caffeine) tai CAS-numerolla (74-85-1)
- Liikuttelu
 - ZOOM – Ctrl + HR
 - Liikuttelu – Aktivoi ja HVN
 - Pyöritys – Aktivoi ja pyöritä mutteria




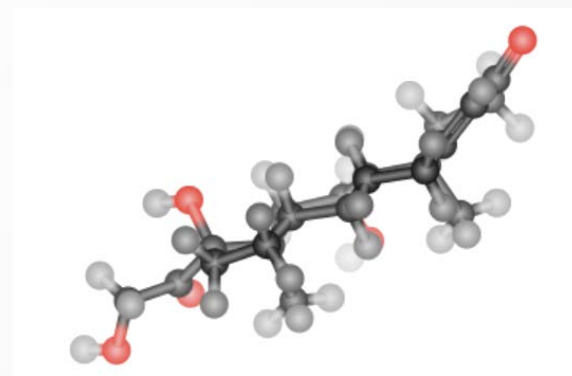


3. DISPLAY-VALIKKO

- JS



- MarvinSketch → Marvin Space
 - View > Configurations > View Mode
 - Avaa Marvin Space 
 - Pikanäppäin: Ctrl + Shift + M



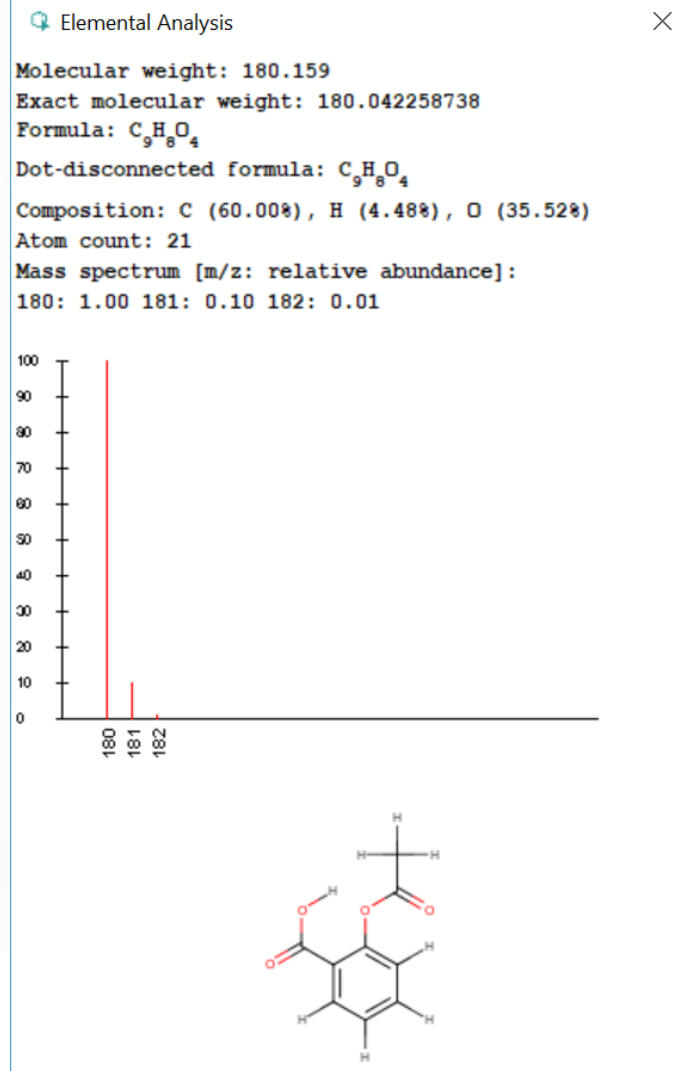
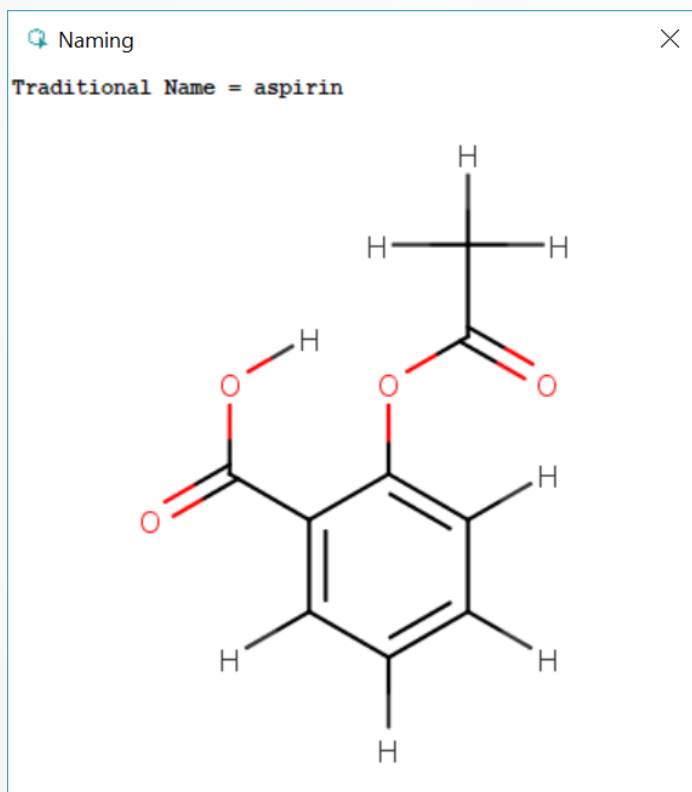


MALLIT JA NIIDEN RAJOITUKSET

MALLI	ESITTÄÄ	RAJOITUKSET
Lanka	Sidokset	Ei atomeja
Putki	Sidokset	Ei atomeja
Pallotikku	3D-muoto, atomit, sidokset	3D-muoto ei ole tarkka
Kalotti tai CPK-malli	3D-muoto ja 3D-tila	Sidokset eivät näy



4. CALCULATIONS (DEMO)

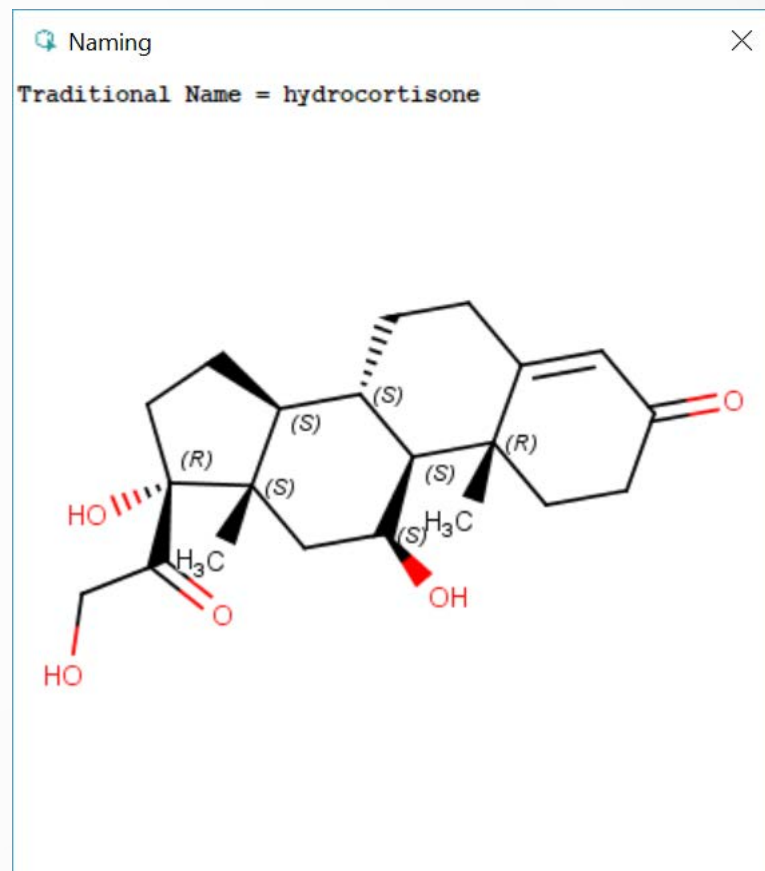




2. KIRAALISUUS - KORTISOLI

- Cortisol
- View > Stereo > R/S
- Naming > Elemental analysis

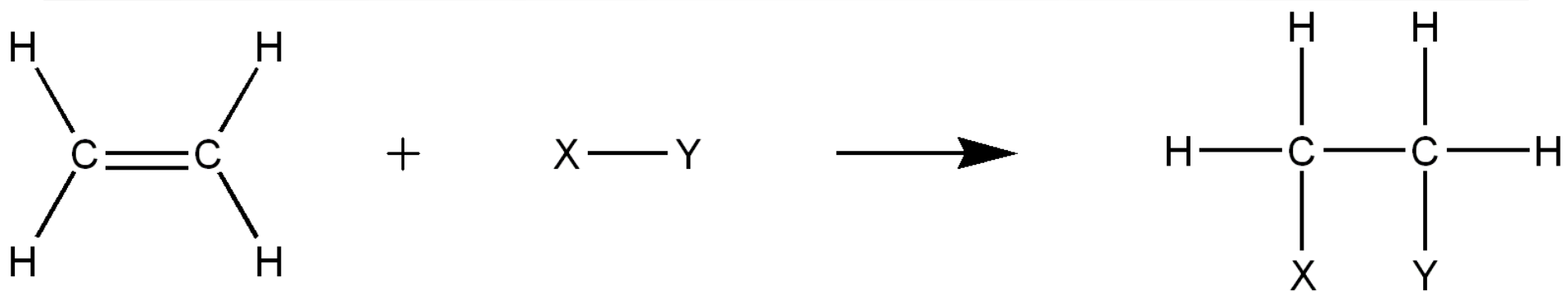
- *YO K2012 T6*





KOTONA: REAKTION PIIRTÄMINEN

- Tästä voitte jatkaa harjoittelua kotona
 - Huom! Minulla MarvinSketch kaatui reaktionuolten myötä





TUKEA JA TUTKIMUSTA

- bit.ly/marvinsketch
 - Arin kalvosarjat
 - Opettajien tekemiä ohjevideoita
 - Linkkejä muiden ohjevideoihin
- Tutkimus
 - MarvinSketchin diffuusio kemian opetukseen
- #marvinsketchsuomi



MarvinSketch

MarvinSketchin ominaisuudet

Koulutukset

Linkit ja tiedostot

Ohjevideot

Tutkimus: MarvinSketchin omaksuminen

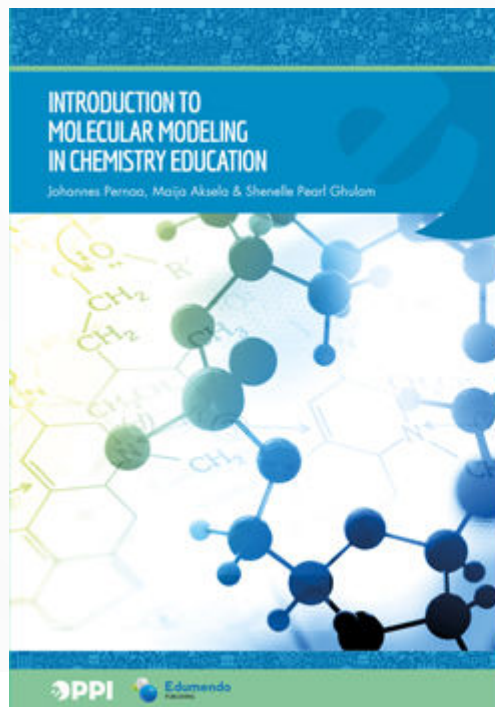




MOOC: MOLEKYYYLI-MALLINNUSTA OPETTAJILLE

- Suunnitteilla
- Toiv. keväällä ulos
- Keskittyy visualisointiin
- n. 20 harjoitustyötä

- Myös laajempaa 5 op. version
 - Sama kuin opiskelijoille



For chemistry teachers

EPUB: 14,99 €
Printed: 24,90 €

Language: English
Pages: 120
Published: 2017
with e-Oppi Ltd.



MUISTA GADOLIN MALLINNUKSET

- Gadolinissa saa mallintaa huippuohjelmistoilla
- Vierailut ovat ilmaisia.
- [Linkki työohjeisiin.](#)



Kemianluokka
Gadolin