



MarvinSketch

19.3.2022

Ari Myllyviita, FM, yhteisöpedagogi (AMK)

**Kemian ja matematiikan lehtori,
Helsingin yliopiston Viikin normaalikoulu**

oppikirjailija, e-Oppi

Kouluttaja, ChemEdu - Myllyviita



Anni Loukomies, Jari Lavonen ja allekirjoittanut Johannesburgissa, putouksilla

Kurssin sisältö



I OSA (1h)

- MarvinSketchin asentaminen ja lisenssi
- MarvinSketch-ohjelman eri versiot
- Molekyylien piirtäminen, perusasetukset

• II OSA (1h)

- MarvinSketch ja isomeria

III OSA (1h)

- MarvinSpace ja/tai 3D-mallintaminen
- Yhdisteiden nimeäminen ja analysointi (massaspektrit ja NMR)
- Erilaisten yhdisteiden (mm. epäorg, polymeerit) piirtäminen
- MarvinSketch ja reaktioyhtälöt

<https://peda.net/oppimateriaalit/kemia/marvinsketch>



 **MarvinSketch**

MarvinSketch

- Ajankohtaista
- MarvinSketchin ominaisuudet
- Koulutukset
- Ohjeet
- Tutkimus: MarvinSketchin omaksuminen
- Diasarjat

Sivukartta

Haku

Arviointipohjat

MarvinSketch

<https://peda.net/p/myllyviita/OrbitaaliMarvinSketch2>

MarvinSketch -kirja lukion käyttöön

<https://peda.net/p/myllyviita/OrbitaaliMarvinSketch2>

Oppilasmateriaalia koekäyttöön - 8.3.2019 koulutuksessa

Tässä on materiaali, jota käytiin läpi MAOL-Helsingin kerhon järjestämässä iltapäiväkoulutuksessa.

Perusteet (pdf): MarvinSketch -ohjelman perusteet - molekyyliden piirtäminen

Isomeriaa (pdf): Isomerin opetuksen tueksi tehty aineisto

Ohjelman lataaminen ym. (pdf): MarvinSketch-ohjelman alkutoimet, lataamisesta lisenssin asentamiseen

Ohjeita (pdf): Ohjelman vaakavalikon esittely

Sähköisessä yo-kokeessa tarpeellisia graafisia esityksiä varten:

Titrauskäyrä (pdf): Titrauskäyrän piirtämisen ohjeet

Liitteet:

[Titrauskäyrä](#)

Twitter-koonti

Twitatakaa hashtagilla **#marvinsketchsuomi**.

Twitteinä esim. kuvakaappauksia kommenttien kera. Kootaan myös aineistoa erilaisista tilanteista, ongelmista, ideoista, löydyistä.

[#marvinsketchsuomi Tweets](#)

Uutisia

[Päivitys 13.10.2017](#)

[Kaksi MarvinSketch-työpajaa Turussa 7.10](#)



Julkaistu 18.5.2019

Orbitaali - MarvinSketch

Lukion kemian molekyyli mallinnuksen oppikirja

Orbitaali - MarvinSketch

- Lukijalle
- MarvinSketchin asentaminen
- 1. Molekyylien piirtäminen (KE1)
- 2. Ohjelman perusasetukset
- 3. MarvinSketch ja isomeria (KE2)
- 4. MarvinSpace (3D)
- 5. Yhdisteiden nimeäminen (KE2)
- 6. Molekyylien analysointi
- 7. Erilaisia yhdisteitä
- 8. MarvinSketch ja reaktioyhtälöt (KE3)
- 9. Massaspektrometria
- VALIKOT
- OPETTAJALLE

Tervetuloa MarvinSketch -opintoihin



Kirjan sisältö

Kirja soveltuu lukion kemian opetuksen tueksi. Painotus on niissä teemoissa (eri lukion kemian kursseilta), joissa MarvinSketch -ohjelman käyttö on mielekästä ja tukee lukion kemian opiskelua.

MarvinSketch on yksi sähköisen ylioppilaskirjoituksen ympäristön ohjelmista.

Tämä sähköinen kirja sisältää:

- ohjelman perusasiat ja niihin liittyviä tehtäviä
- ohjelman eri käyttötarkoitukset - huomioiden lukion kurssien sisällöt
- opettajalle tarkoitettua osion (perusteoriaa ohjelman käyttötarkoituksiin liittyen)
- lyhyt sanasto käsitteistä

e-Oppi: Orbitaali - MarvinSketch

Ohjeita ohjelman käytöstä lukiolaisille ja opettajille

Uusi painos ilmestynyt Orbitaali – MarvinSketch -kirjasta



2.painos julkaistaan 31.3.2022

Orbitaali - MarvinSketch II

Lukion kemian molekyylihallinnuksen oppikirja



Olet sivulla roolissa: Ylläpitäjä

Ari Myllyviita > Orbitaali - MarvinSketch II

Orbitaali - MarvinSketch II

Lukijalle

1. MarvinSketchin
asentaminen

2. Käytön aloittaminen

Tervetuloa Mar

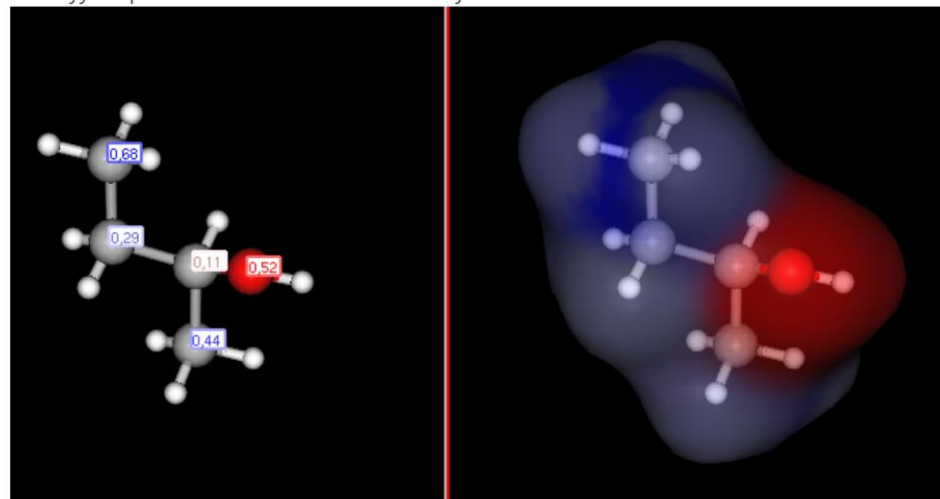
Kirjan sisältö

Kirja soveltuu lukion kemian opetukselle (esimerkiksi opetus- ja tutkimuskursseilta), joissa MarvinSketch -ohjelman käyttö on mielekästä ja tukee lukion kemian opiskelua.

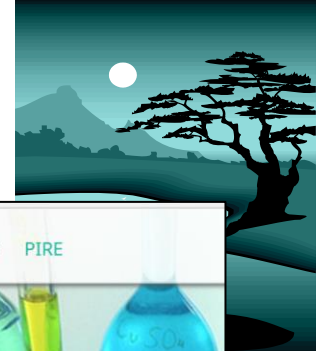
MarvinSketch on yksi sähköisen ylioppilaskirjoituksen ympäristön ohjelmista.

Uutta Orbitaali - MarvinSketch II -kirjassa

Molekyylien analysointi -kappaleessa on uusi osio, jossa käsitellään molekyylien liukoisuutta (logP). Samassa yhteydessä ilmenee mahdollisuus tuottaa molekyyleistä 3D-kuvia, joissa näkyy molekyylien poolisuutta kuvaavat elektroniheydet.



Orbitaali - MarvinSketch II -kirjassa. Kirjaan on lisätty toiminnallisia videoita (opastusvideoita ja huomioita erilaisista pulmakohdista). Kirja tähtää Abitissa



Search for anything on this site...

FLIPPED CLASSROOM

MARVINSKETCH

OPS

PIRE

ETUSIVU

KEMIAN OPETUS VIIKISSÄ JA TVT – 21.8.2014

ORBITAALI -SARJA – LUKION KEMIAN SÄHKÖISET MUOKATTAVAT OPPIKIRJAT (20.6.16)

MARVINSKETCH

MarvinSketch – lukion kemian opetuksen onni vai onnettomuus – OSA 6: MarvinSketch ja isomerian opetus

5 months ago admin

Muuttuuko isomerian opetus MarvinSketch -ohjelman myötä

Abitti-järjestelmän MarvinSketch- ohjelma asettaa isomerian opiskelulle ja ainakin sen osaamisen sähköiselle arvioinnille haasteita. Ohjelma kun "osaa" isomerian ja antaa valmiiksi mm. asymmetria-keskuksen (jos 2D-

Viimeisimmät artikkelit

Computex-tapahtuma Taipeiissa 6.-8.6.2018

Matka Computex 2018 -tapahtumaan Taiwaniin – Digiloikkaan visioita ja käytännön ideoita kaksi vuotta edellä aikaansa

MarvinSketch – lukion kemian opetuksen onni vai onnettomuus – OSA 6: MarvinSketch ja isomerian opetus

Kemian viimeinen "paperinen" yo-koe – mitä opittiin ja mitä jatkossa?

MarvinSketch – lukion kemian opetuksen onni vai onnettomuus – OSA 5: MarvinSketch ja vapaat elektroniparit



MarvinSketch – lukion kemian opetuksen onni vai onnettomuus

ARI MYLLYVIITA, kemian ja matematiikan lehtori, Helsingin yliopiston Viikin normaalikoulu.

1. Peruslähtökohtia

Abitti ja Marvsketch

Pitkään odotettiin YTL:n päätöstä molekyyli mallinnusohjelmasta osana Abitti-koejärjestelmää ja osana tulevaa sähköistä kemian ylioppilaskoetta. Kouluissa oli pitkään ollut käytössä ChemSketch-niminen (mm. Mooli-nimisen oppikirjan rompullakin jaettu) 3D-molekyyli mallinnusohjelma. Monen harmiksi tämä ei sitten tullut Abittiin mukaan. Kouluissa on ollut käytössä laajasti Molview.org-sivuston molekyyli mallinnusohjelma, sen rajoitteista huolimatta – toisaalta sen erinomaisten elektronitiheyskuvausten vuoksi. Myös Avogadro -nimisen ohjelman käyttäjiä löytyy.

MarvinSketchin asennus

MarvinSketch-ohjelman asentamiseen on liittynyt

tähän löytyy Peda.netin MarvinSketch-sivustolta: <http://bit.ly/marvinsketch>. Asennuksessa vaatimus javasta voi aiheuttaa jatkossa monelle pulmia, jos itsellä ei ole admin-oikeuksia omiin laitteisiinsa. Java päivittyy aika ajoin ja MarvinSketch seuraa myös tätä.

MarvinSketch-ohjelmasta on tällä hetkellä (6.1.2018) versio 18.16.0 ja Abitin versio on 17.3.27. Versioiden välillä on eroja, mutta oleellisilta osin työskentely tapahtuu samalla tapaa – asioita löytyy hieman eri valikoista, mutta niihin tottuu käytön myötä.

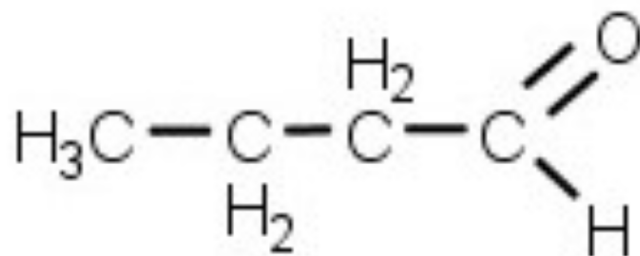
On hyvä määritellä lukiolaisten kanssa ne asiat, joita itse ylioppilaskirjoituksessa käytetään ja mitkä liittyvät mielekkääseen kemian rakenteiden opiskeluun.

MarvinSketch ja Academic Teaching Licence

MarvinSketch -ohjelma on maksullinen ohjelma, se voidaan ladata kokonaisuudessaan asennettavaksi

27. elokuu kello 9.27

Hei. Kun piirretään orgaanisia molekyyliä vaikka MarvinSketchillä, millaista molekyyliämuotoa suositte: viivakaavaa vai näkykö kaikki sidokset ja vedyt? Käytättekö missään kuvassa näkyvää muotoa?



2

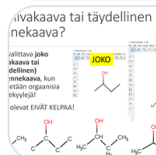
5 kommenttia

Tykkää

Kommentti



Ari Myllyviita Tässä minun ajatuksia asiasta:
<http://myllyviita.fi/kemia/?p=284>



MYLLYVIITA.FI

MarvinSketch – lukion kemian opetuksen onni vai onnettomuus – OSA 2:...

Tykkää · Vastaa · Poista esikatselu · 4 pv

2



Ari Myllyviita Ko. kuvassa näkyvät "vetymolekyylit" ovat minusta harhaanjohtavia merkintöjä. Itse en tätä käyttäisi missään. Tämä on yksi MarvinSketch-ohjelman pulmista, ettei se ymmärrä tiivistettyä rakennekaavaa tyyliin H3C-CH2-CH2-COOH. Sen toki voi kirjoittaa kaavaeditorilla Abitissa.

Tykkää · Vastaa · 4 pv

3

Kiitos. En tosiaan osannut piirtää niin, että välissä lukisi CH2, vaan ne tulevat noin tuohon "ulkopuolelle".



Download Marvin

Version 21.9

[DOWNLOAD LATEST FOR WINDOWS \(MARVIN WITH OPENJDK 64 BIT\)](#)

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

NOTE for Windows users

You might encounter Windows Defender SmartScreen at installation or start. We are working on fixing this issue. In the meantime, please click on the "More info" link, then push the "Run anyway" button. Thank you! [Read more](#).

Get Your License

To obtain the license file choose from the following options

[COMMERCIAL USE](#)

[NON-COMMERCIAL USE](#)

MarvinSketchin asentaminen ja lisenssi

MarvinSketchin lataaminen



Ensimmäinen valinta:

- Halutaanko pitää MarvinSpace-apuohjelma (3D) mukana?
- EI LADATA UUSINTA VERSIOTA!
- **Ladataan versio 20.8.5 Fermium**

MarvinSpace mahdollistaa "Editor"-moodissa 3D-kuvien tuottamisen, niihin voidaan määritellä mm. sidoskulmia, sidospituuksia.

Huomioita:

- **Abitti-versiossa** ei ole MarvinSpace-ominaisuutta suoraan (ei ole enää uusissa versioissa mukana)
- MarvinSpace –apuohjelma **edellyttää lisenssiä** (kts. seuraava dia)
- Uudet versiot eivät sisällä merkittäviä lisätoimintoja tai uusia ominaisuuksia
- Uusin versio on 21.13.

Ohjelman lataaminen



Eri käyttöjärjestelmät?

- Löytyy Windows – MacOS (ei iPad) – Linux
- Java-vaatimus!

Java-vaatimus – ladataan erikseen vai mukana

- Jos laitteessa ei ole Javaa asennettuna (edellyttää admin-oikeudet), kannattaa valita **tiedosto, jossa Java mukana**, esim. Marvin with OpeJDK

Eri versiot



DOWNLOAD

DEB

RPM

GRADLE



Windows

Includes Marvin desktop applications, API, examples, documentation.

[DOWNLOAD MARVIN WITH OPENJDK 64 BIT](#)

[DOWNLOAD MARVIN 64 BIT](#)

[DOWNLOAD MARVIN 32 BIT](#)



Mac OS X

Drag and Drop installer for Marvin desktop application.

[DOWNLOAD MARVIN WITH OPENJDK .DMG](#)

[DOWNLOAD MARVIN .DMG](#)



Linux

Marvin desktop package installer (no-arch) for Debian (e.g.: Debian, Ubuntu) or RedHat based distributions (e.g.: RedHat, CentOS, Fedora)

[DOWNLOAD MARVIN WITH OPENJDK DEBIAN](#)

[DOWNLOAD MARVIN WITH OPENJDK REDHAT](#)

[DOWNLOAD MARVIN FOR DEBIAN](#)

[DOWNLOAD MARVIN FOR REDHAT](#)

[SHOW OLDER VERSIONS](#)

Lisenssin hyväksyminen (asentaminen)



Install license file

Please enter the location of the license file or press the Browse button to select path from the file system.

After specifying the path, press the Install button.

License file:

Browse...

Install

If your e-mail client supports drag and drop of attachments, you can drag the license file you received by e-mail to this dialog.

The following licenses

Hae (Browse...) tiedosto omalta koneelta. Ja asenna (install) se.

Software

- Install license file
- License overview
- Product license details
- Help
 - ChemAxon licensing
 - ChemAxon products
 - Request license
 - Getting help
 - Installing licenses
 - Frequently asked questions
 - Create report

Install license file

Please enter the location of the license file or press the Browse button to select path from the file system.

After specifying the path, press the Install button.

License file:

Browse...

Install

If your e-mail client supports drag and drop of attachments, you can drag the license file you received by e-mail to this dialog.

The following licenses will be installed by pressing the Install button:

Software St... License ... Licensee Expiratio... Support ... R

Open

Look in: C:\Users\admin\Downloads

Viimeisim...

ChemAxon License Manager

Install license file

Please enter the location of the license file or press the Browse button to select path from the file system.

After specifying the path, press the Install button.

License file: C:\Users\admin\Downloads\license_cx

Browse... Install

If your e-mail client supports drag and drop of attachments, you can drag the license file you received by e-mail to this dialog.

The following licenses will be installed by pressing the Install button:

Asentamisen jälkeen:

Install license file

Please enter the location of the license file or press the Browse button to select path from the file system.

After specifying the path, press the Install button.

License file: C:\Users\admin\Downloads\license_cx

If your e-mail client supports drag and drop of attachments, you can drag the license file you received by e-mail to this dialog.

The following licenses will be installed by pressing the Install button:

Software	Status	License ...	Licensee	Expiratio...	Support ...	Restriction	Number of ...	Comment
Marvin Applets	To be installed	Academic Teaching	The Universi	2019-04-04	2019-04-04	Server Use: Not Allowed	Unlimited	academic teaching
Marvin Beans	To be installed	Academic Teaching	The Universi	2019-04-04	2019-04-04	Server Use: Not Allowed	Unlimited	academic teaching
Instant JChem	To be installed	Academic Teaching	The Universi	2019-04-04	2019-04-04	B/S/P/E: Standard Server Use: Not Allowed	Unlimited	academic teaching
JChem Base	To be installed	Academic Teaching	The Universi	2019-04-04	2019-04-04	Search/Min: Unlimited Server Use: Not Allowed	Unlimited	academic teaching
Standardizer	To be installed	Academic Teaching	The Universi	2019-04-04	2019-04-04	B/S/P/E: Standard Server Use: Not Allowed	Unlimited	academic teaching
Screen	To be installed	Academic Teaching	The Universi	2019-04-04	2019-04-04	Server Use: Not Allowed	Unlimited	academic teaching
Reactor	To be installed	Academic Teaching	The Universi	2019-04-04	2019-04-04	Server Use: Not Allowed	Unlimited	academic teaching
JKlustor	To be installed	Academic Teaching	The Universi	2019-04-04	2019-04-04	B/S/P/E: Standard Server Use: Not Allowed	Unlimited	academic teaching
Metabolizer	To be installed	Academic Teaching	The Universi	2019-04-04	2019-04-04	Server Use: Not Allowed	Unlimited	academic teaching

Ari Myllyviita

ari.myllyviita@helsinki.fi

PROFILE

LICENSES

Active Licenses

Lataa tiedosto omalle koneelle ja jaa se oppilaille koulun verkossa

Valid Until	Type	Comment	
Apr 4, 2019	Academic Teaching	academic teaching license	DOWNLOAD

Mitä haluat tehdä seuraavalle license.cxl (22.1 kt)?
enses/138139/download | le: accounts.chemaxon.com

Avaa Tallenna ^ Peruuta ×

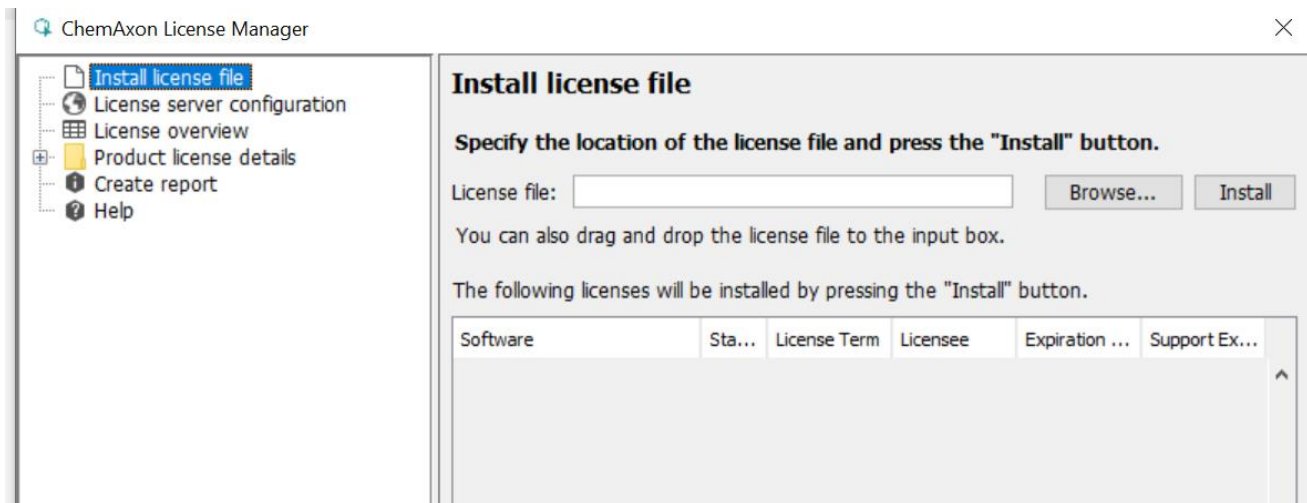
Mitä haluat tehdä seuraavalle license.cxl (22.1 kt)?
/download | le: accounts.chemaxon.com

Avaa

Tallenna

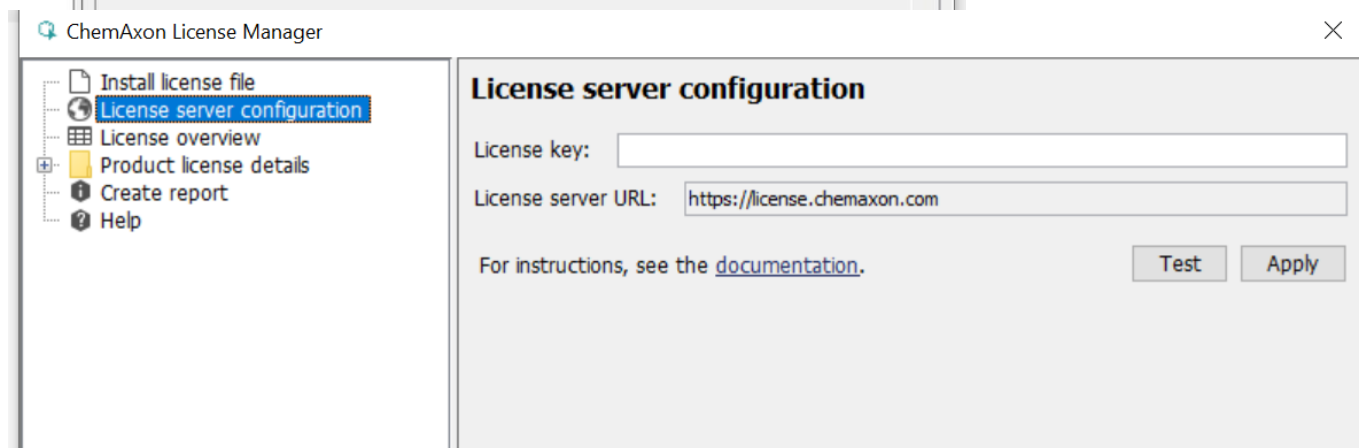


Lisenssin lisääminen asennettuun MarvinSketch-ohjelmaan



TIEDOSTO
(aiemmat versiot)

AVAIN (KEY)
(aiemmat versiot)

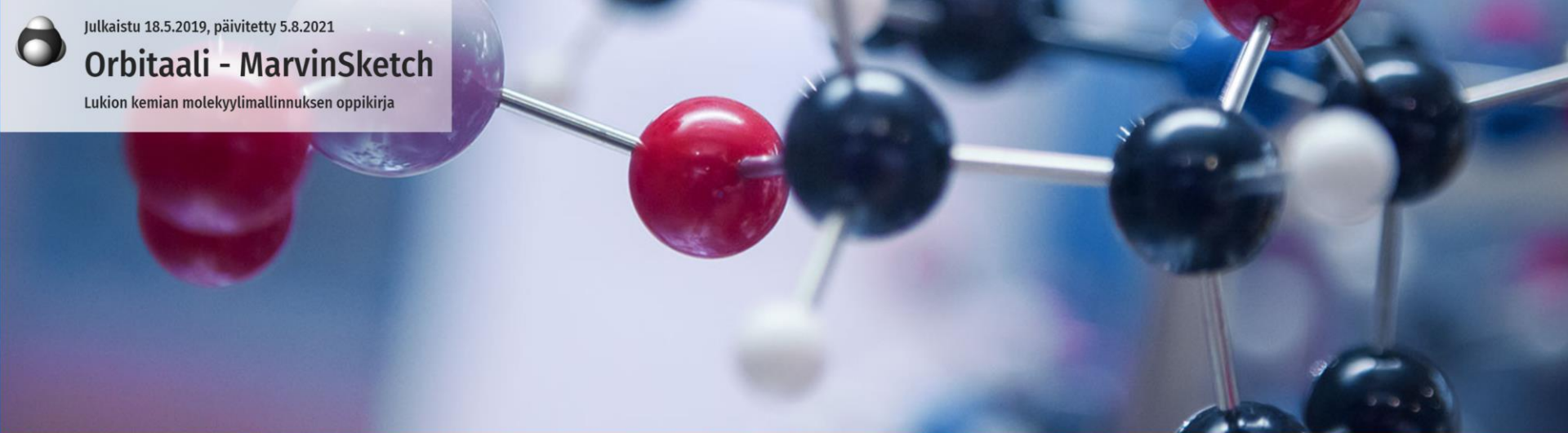




Julkaistu 18.5.2019, päivitetty 5.8.2021

Orbitaali - MarvinSketch

Lukion kemian molekyylihallinnuksen oppikirja



 Olet sivulla roolissa: Ylläpitäjä

Ari Myllyviita > Orbitaali - MarvinSketch

Orbitaali - MarvinSketch	^
Lukijalle	v
MarvinSketchin asentaminen	
1. Molekyylien piirtäminen	v

Tervetuloa MarvinSketch -opintoihin

[+ Luo](#) [=](#) [★](#) [↔](#) [i](#)

MarvinSketch -version valinta

MarvinSketch-version valinta edellyttää mm. seuraavien asioiden pohtimista:

Kirjan sisältö

Kirja soveltuu lukion kemian opetuksen tueksi. Painotus on niissä teemoissa (eri lukion kemian kursseilta), joissa

MarvinSketch-version valinnan vaikeus

MarvinSketch-ohjelmaversioiden valinta



Huomioitava asia	MS-versio	Toimenpiteitä?	Mistä löytää
3D-toiminto (MarvinSpace Editor-moodissa) (*)	< 20.8. Fermium	Tähän ohjeet löytyvät kirjasta	Ei löydy enää ChemAxon-sivuilta
3D-toiminto - Erillinen MarvinSpace -ohjelma	> 20.8. Fermium	Asennetaan erikseen.	ChemAxon -arkistosta
Lisenssitoiminnot (** (alla tarkemmin)	kaikki	Opettajan hakee lisenssiavaimen	ChemAxon -sivut, opettajan tunnus
NMR-spektroskopia	kaikki	Edellyttää lisenssiä (tiedosto/avain)	

*) 3D-toiminta merkittävä toiminto avaruusgeometrian opetuksessa (ja oppimisessa)

**) Lisenssitoiminnot: mm. Calculations -alavetovalikossa lisäävät ohjelman käyttömahdollisuuksi mm. NMR-spektroskopian osalta ja isomerian opetuksen osalta.

MarvinSketch View-moodissa



MarvinSketch Fermium.5

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

Mouse Mode > 100 %

Zoom Level >

Structure Display >

Colors >

Stereo >

Implicit Hydrogens >

Peptide Display >

Advanced >

Pages >

Toolbars >

Menubar F11

Status Bar

Grid Shift+F9

Guidelines Ctrl+Shift+F9

Editor Style >

- Marvin
- Marvin v5.0
- View Mode
- Configuration Settings...
- Reset Current Configuration
- Customize...

MarvinSketch Fermium.5

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

200 %

Transform >

Zoom >

Display >

Colors >

Stereo >

Implicit Hydrogens >

Peptide Display >

Misc >

Pages >

Periodic System... Ctrl+E

Open MarvinView2D

Open MarvinView3D

Toolbars >

Menubar F11

Status Bar

Grid Shift+F9

Guidelines Ctrl+Shift+F9

Configurations >

Customize...

OH

Marvin

Marvin v5.0

View Mode

Reset Current Configuration

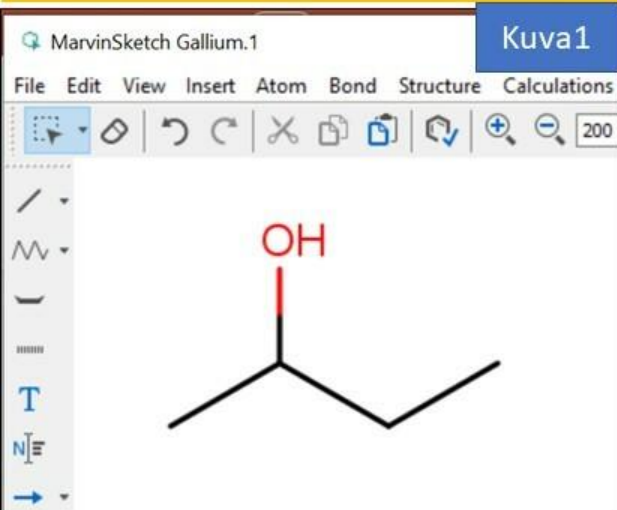
Configuration Settings...

MarvinSketch Abitti –versio ja 3D-mallinnus

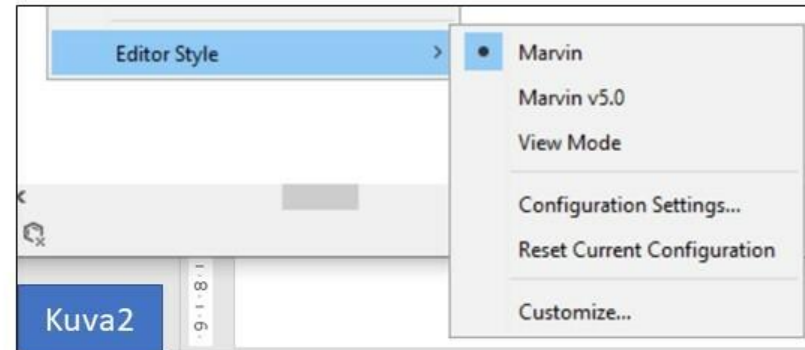
Abitti-
versio nyt
21.9



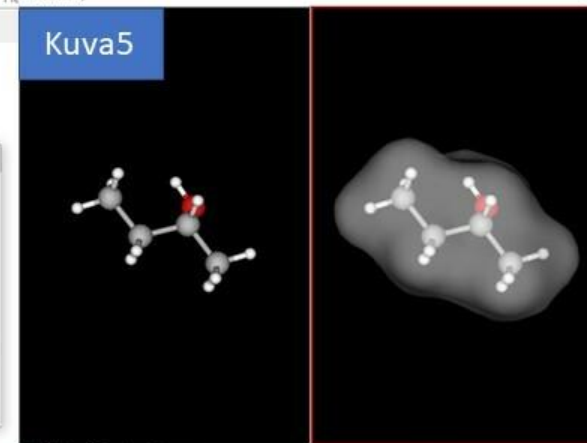
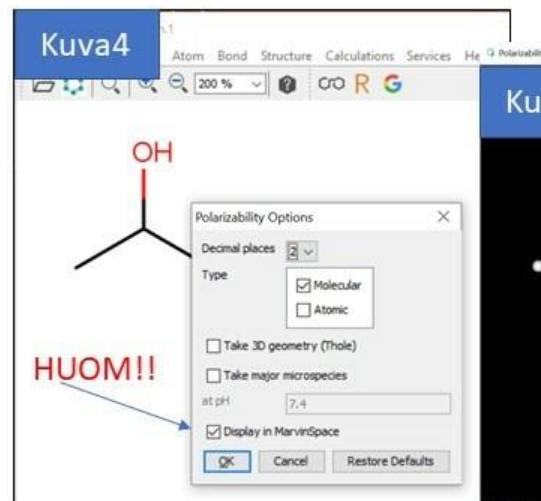
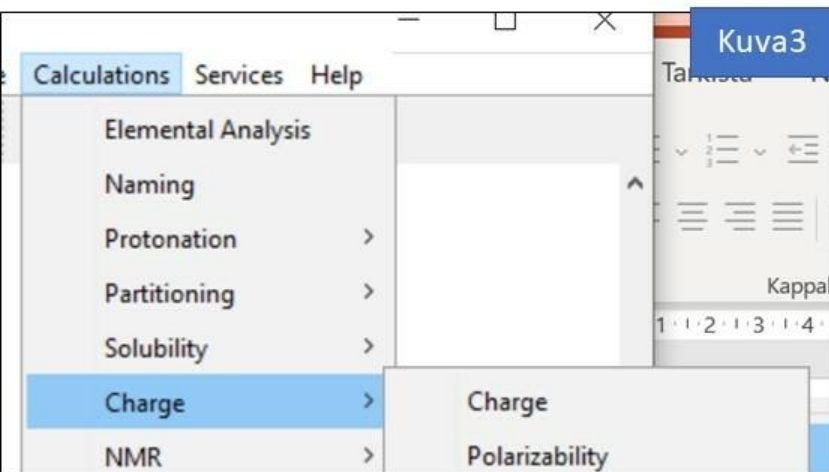
MarvinSpace Abittiversiossa



1. Piirretään ensin molekyyli (**kuva1**) ja
2. Sitten **vaihdetaan** (Editor-
alasvetovalikko) Editor
Style View Modeen
(**kuva2**)
3. View Modessa (jota ei
siis yleensä juurikaan
käytetä) **valitaan**
Calculations–
alasvetovalikosta Charge
–kohdasta Polarizability
(**kuva3**).



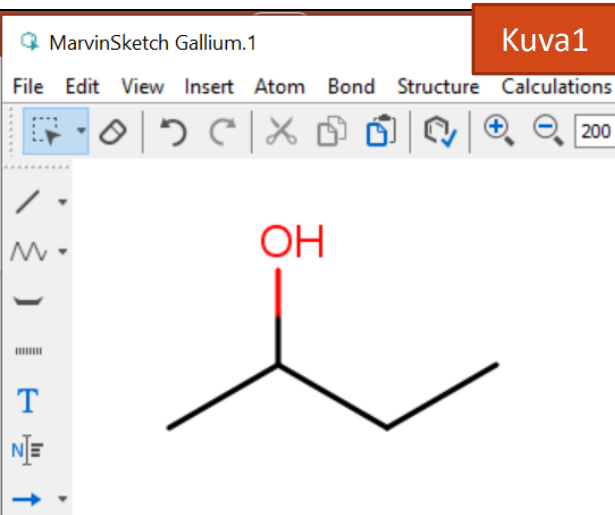
4. Polarizability–valintaruudussa valitaan
Molecular-vaihtoehto (**kuva4**) ja valitaan ok.
5. **Kuvassa 5** on sitten 3D-kuvat (näkyvät kuten
MarvinSpace–ohjelmalla) ja niitä voi pyörittää.



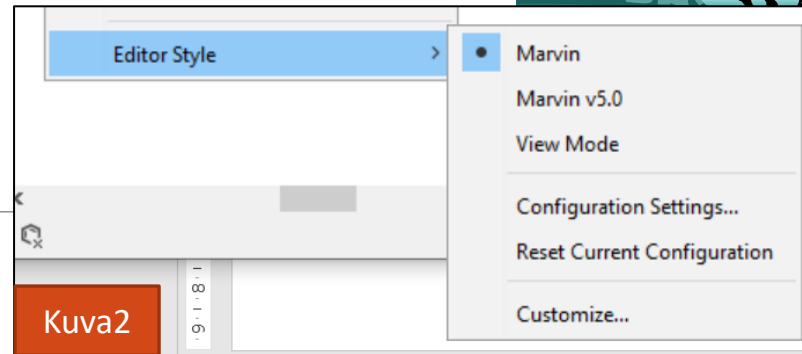
MarvinSpace Abittiversiossa



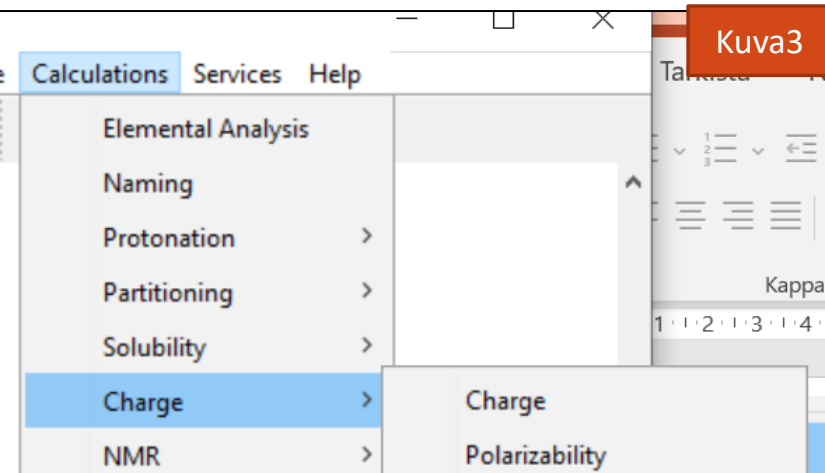
1. Piirretään ensin molekyyli (kuva1)



2. Sitten **vaihdetaan** (Edit-alasvetovalikko) Editor Style View Modeen (kuva2)

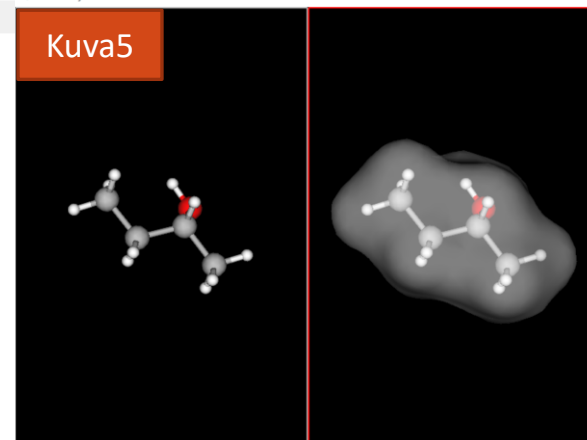
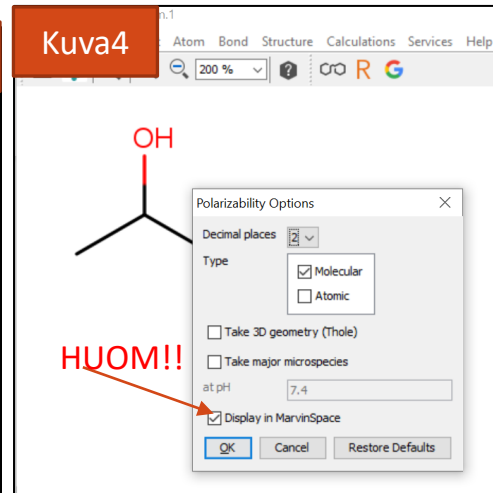


3. View Modessa **valitaan** Calculations –alasvetovalikosta Charge –kohdasta Polarizability (kuva3).

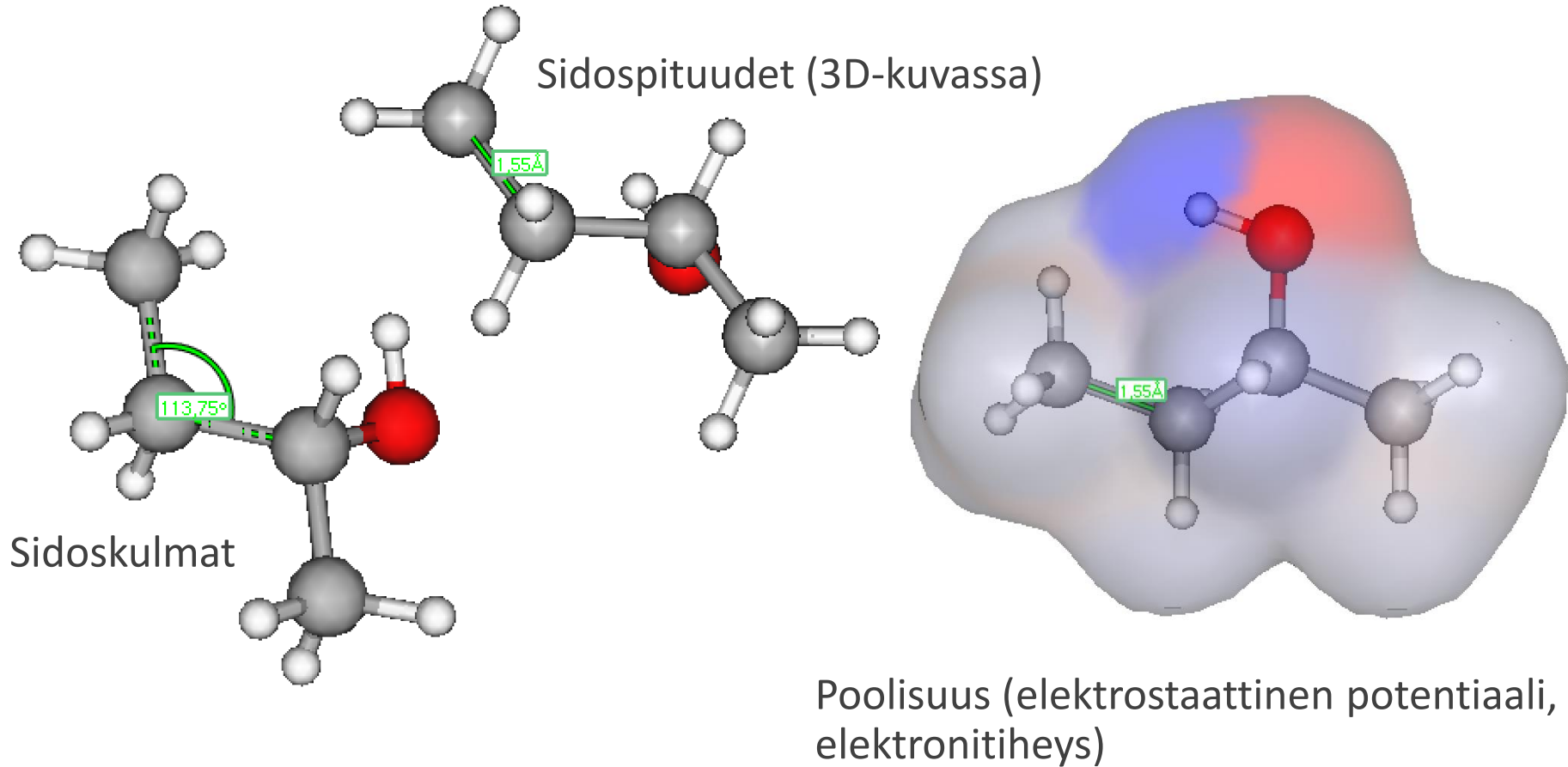


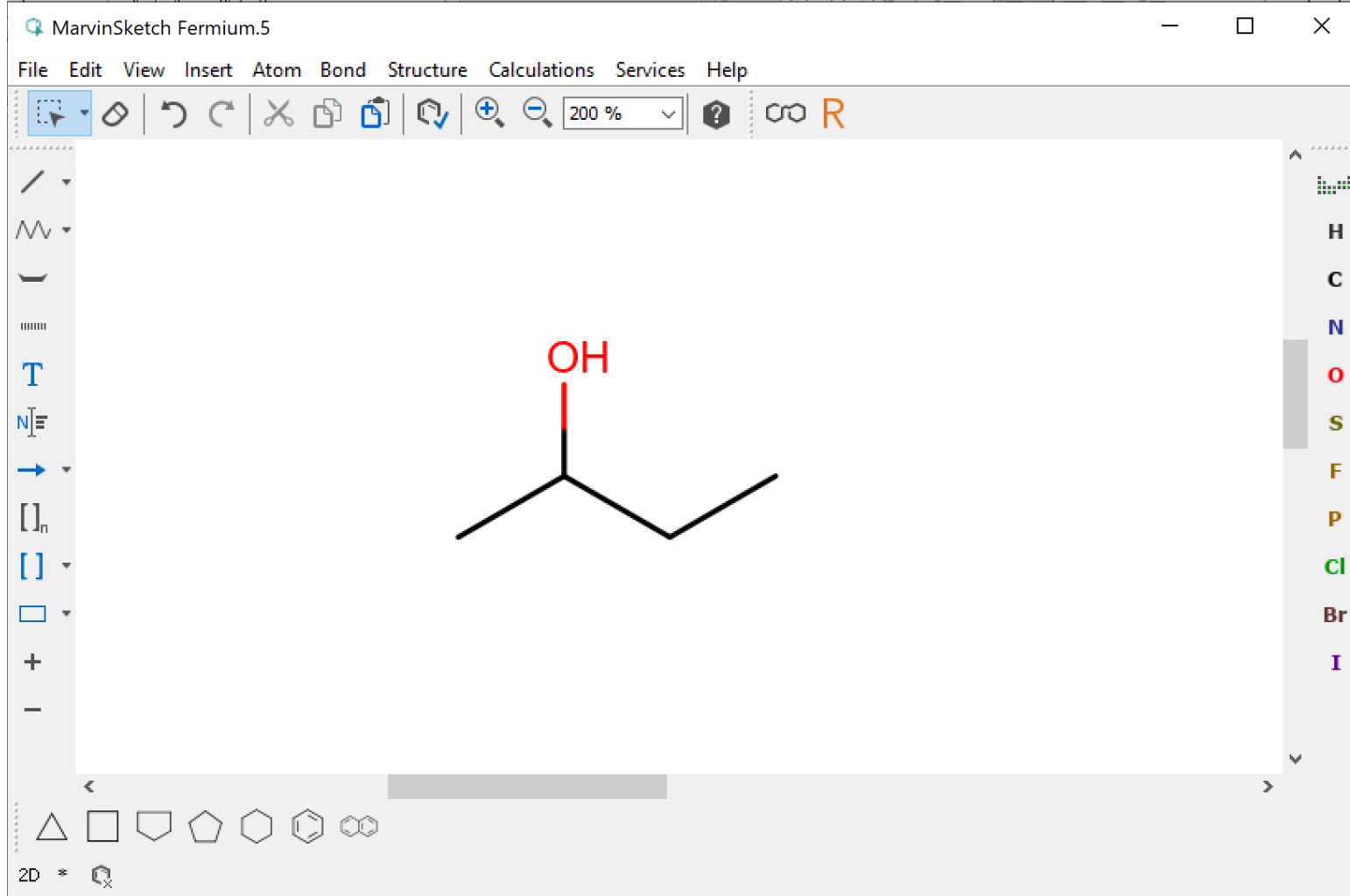
4. Polarizability –valintaruudussa valitaan Molecular-vaihtoehto (kuva4) ja valitaan ok.

5. **Kuvassa 5** on sitten 3D-kuvat (näkyvät kuten MarvinSpace –ohjelmalla) ja niitä voi pyörittää.



Mitä jää uupumaan?





MarvinSketch – perustoiminnot, molekyylin piirtäminen

MarvinSketch 19.2 Vaakavalikko - toiminnallisuudet

File Edit View Insert Atom Bond Structure Calculations Services Help

Yleisvalikko - Valinta, pyyhekumi, Undo/Redo ...

Perustyökalut

Työpöytä

Alkuaineatomit

Valmiita rakenteita

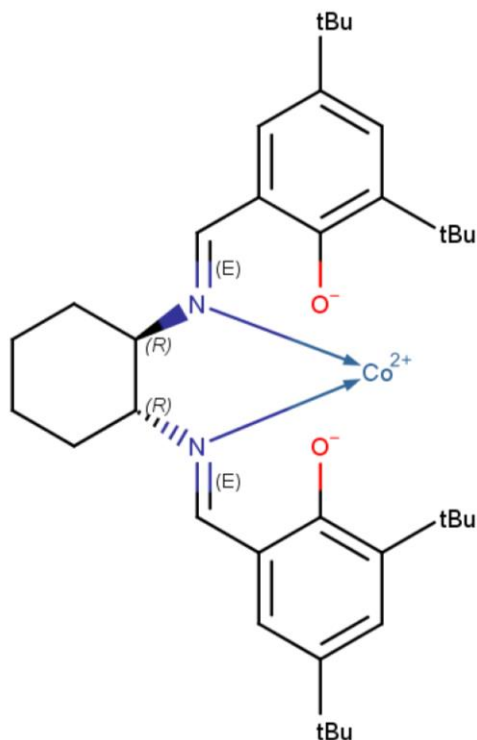
Valikkotila

The image shows the MarvinSketch 19.2 software interface. At the top is a menu bar with options: File, Edit, View, Insert, Atom, Bond, Structure, Calculations, Services, and Help. Below the menu bar is a toolbar containing icons for selection, erasing, undo, redo, cutting, copying, pasting, and zooming. The main workspace is a large white area where chemical structures are drawn. On the left side of the workspace is a vertical toolbar with icons for drawing lines, curves, polygons, and text. On the right side is a vertical periodic table of elements, with the first few elements (H, C, N, O, S, F, P, Cl, Br, I) visible. In the center of the workspace, there is a light brown rectangular box labeled 'Työpöytä'. To the left of this box, the text 'Perustyökalut' is written. To the right, 'Alkuaineatomit' is written. At the bottom of the workspace, there is a horizontal toolbar with icons for pre-defined chemical structures (triangle, square, pentagon, hexagon, benzene ring, fused rings). Below this toolbar, the text 'Valmiita rakenteita' is written with an orange arrow pointing to the structure icons. In the bottom-left corner, the text 'Valikkotila' is written with an orange arrow pointing to the '2D' button.

Edit | Preferences - Bonds



Koordinaatiosidoksien
merkitätapa: Nuoli
kertoo elektroniparin
lähteen ja kohteen.
Esim.:



MarvinSketch 19.2

File Edit View Insert Atom Bond Structure Calculations Services Help

100%

Preferences

Bonds | Structure | Text | Checkers | Services | Save/Load | 3D Options | Analysis Box

Show Bond in Hand

Down Wedge Orientation
Wedge bond display convention. Down wedge points downward in MDL's convention, upward (at the chiral center) in Daylight's.

Points Downward (MDL)
 Points Upward (Daylight)

Terminal Bond Deletion Method
This option specifies if the terminal bond is also deleted when clicking on a terminal bond with the eraser tool. The ALT button modifies this behavior on the fly.

With the Terminal Atom
 Without the Terminal Atom

"Any" Bond Line Style
How to display bonds with unknown order. "Automatic" means dashed line in most cases, solid line only when all bonds are generated from atom coordinates (e.g. XYZ and PDB files).

MarvinSketch	MarvinView
<input checked="" type="radio"/> Automatic	<input checked="" type="radio"/> Automatic
<input type="radio"/> Dashed	<input type="radio"/> Dashed
<input type="radio"/> Solid	<input type="radio"/> Solid

"Coordinate" Bond Line Style
How to display coordinate bonds between Single atoms or if a Multicenter atom is involved.

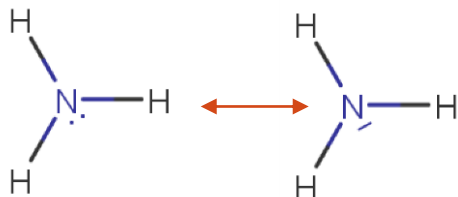
Single Atoms	Multicenter
<input checked="" type="radio"/> Arrow	<input checked="" type="radio"/> Hashed
<input type="radio"/> Solid	<input type="radio"/> Solid

Help Contents... | Restore Defaults | OK | Cancel

Edit | Preferences - Structure



Yleiset asetukset (General settings) käsittelee **vapaiden elektroniparien** (Lone Pair) ja **varauksien merkintätapoja** (näin palataan myöhemmin).



Hiiliatomien merkintä (Carbon Labels) on tärkeä kohta. Valinta on joko **Always** (täydellinen rakennekaava) tai **Newer** (viivakaava).



(Tähän palataan myös)

MarvinSketch 19.2

File Edit View Insert Atom Bond Structure Calculations Services Help

100%

Preferences

Bonds Structure Text Checkers Services Save/Load 3D Options Analysis Box

MarvinSketch Highlight Valence Errors

Automatic Lone Pair Calculation

Automatic Plus Signs in Single Step Reactions

Validate S-groups at Creation

MarvinView Highlight Valence Errors

General Settings Show Lone Pair as Line

Show Charge in Circle

Carbon Labels Always

Never

At Straight Angles and at Implicit H Atoms

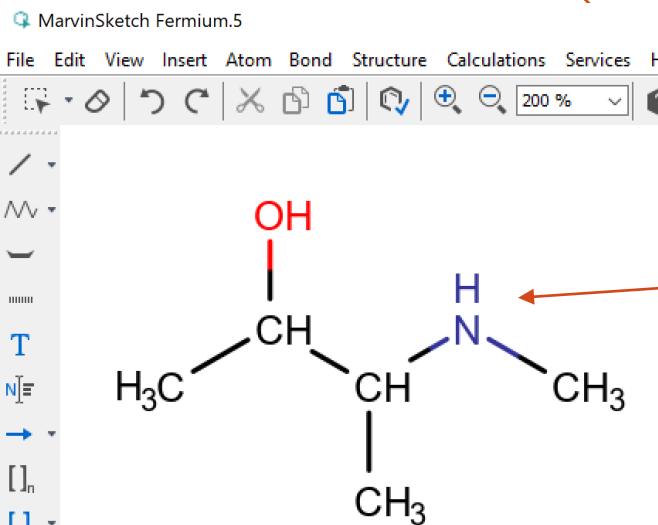
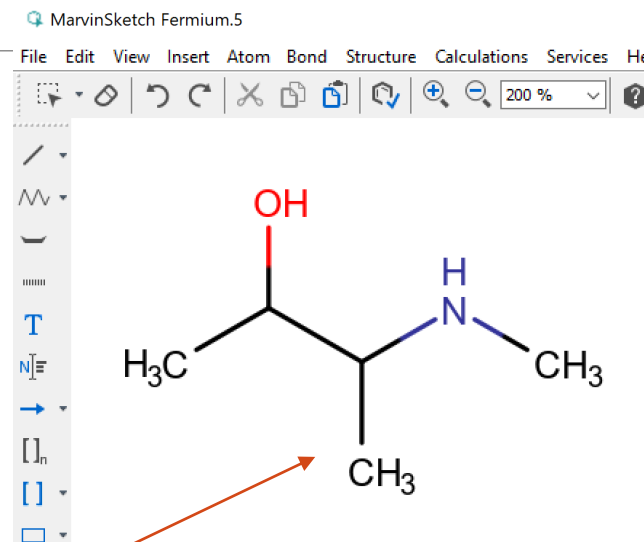
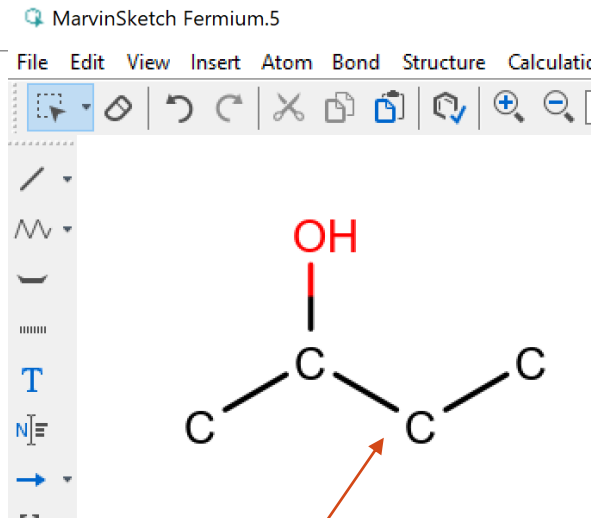
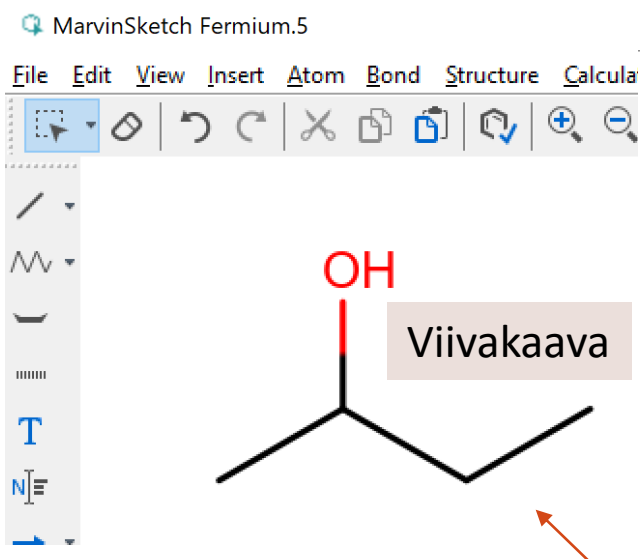
Ligand Orders Always

Never

On R-groups with Definitions

Help Contents... Restore Defaults OK Cancel

Hiiliatomien näyttäminen ja vedyt – viivakaava ja MUUT



General Settings Show Lone Pair as Line
 Show Charge in Circle

Carbon Labels Always
 Never
 At Straight Angles and at Implicit H Atoms

Ligand Orders Always

Lisäksi valittu View –kohdasta Implisit Hydrogen | **On Hetero and Terminal**

Lisäksi valittu View –kohdasta Implisit Hydrogen | **On All**

Display Options for Implicit and Explicit Hydrogens

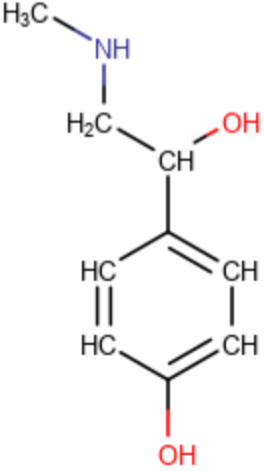
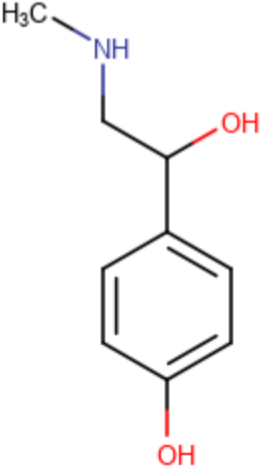
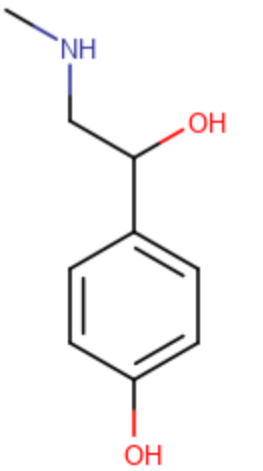
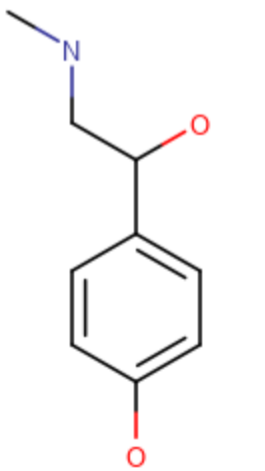


In MarvinSketch hydrogens are automatically added to the structures. Generally, these are implicit hydrogens and are displayed based on the options set in **View > Implicit Hydrogens**.

To view all hydrogens explicitly displayed as atoms with bonds to neighbors, chose **Structure > Add > Add Explicit Hydrogens**. The **Structure > Remove > Remove Explicit Hydrogens** will return to the previous display mode. You can use these functions locally, that is, only apply it to the selected structures.

To view implicit hydrogens by symbol, use the **View > Implicit Hydrogens** menu group. This option is disabled in **Spacefill** and **Ball and Stick** display modes.

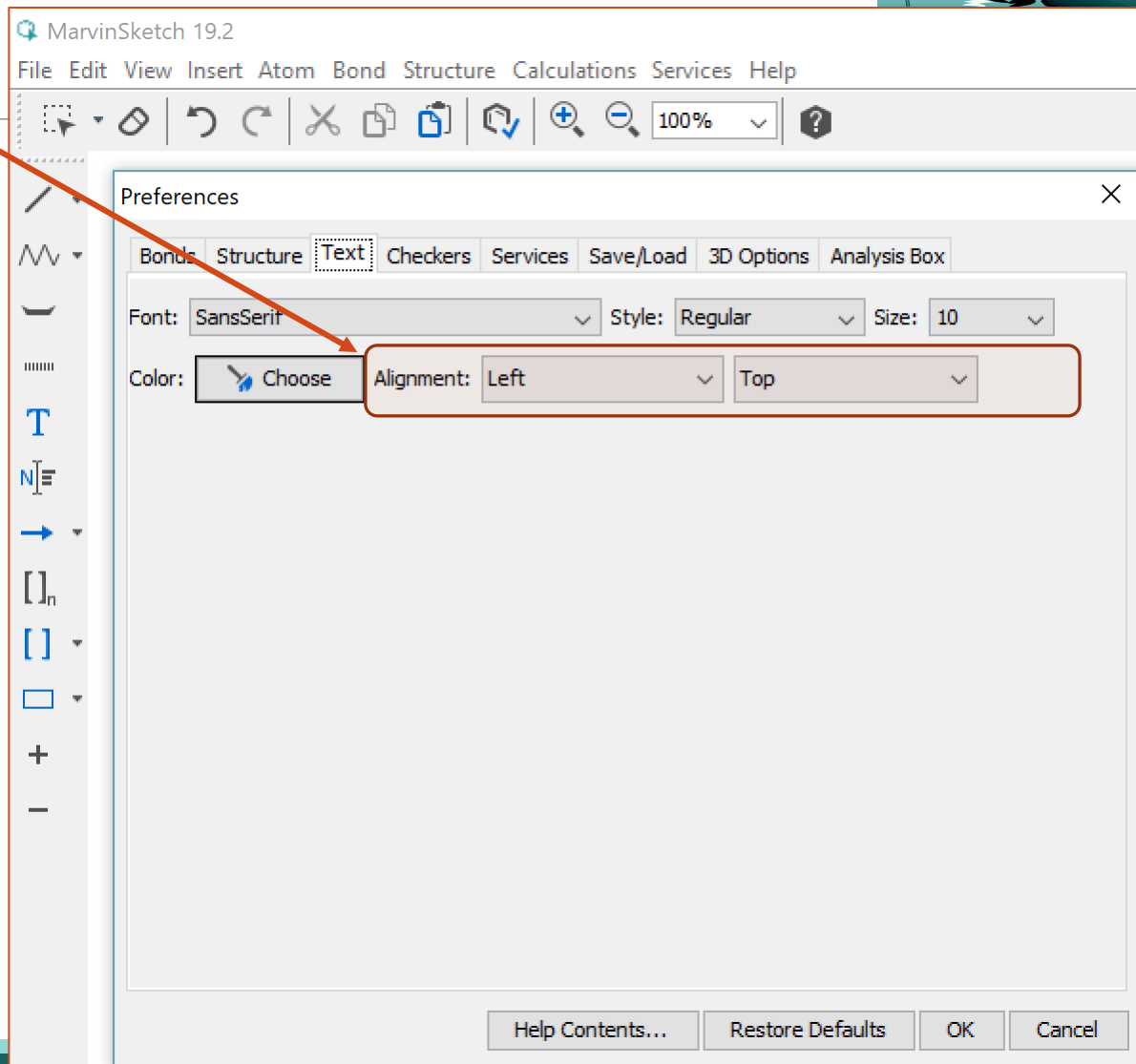
The table below lists the available implicit hydrogens options with examples.

On All	Hetero and Terminal	Hetero	Off
 <chem>CNCC(O)c1ccc(O)cc1</chem>	 <chem>CNCC(O)c1ccc(O)cc1</chem>	 <chem>CNCC(O)c1ccc(O)cc1</chem>	 <chem>CNCC(O)c1ccc(O)cc1</chem>

Edit | Preferences – Text ...



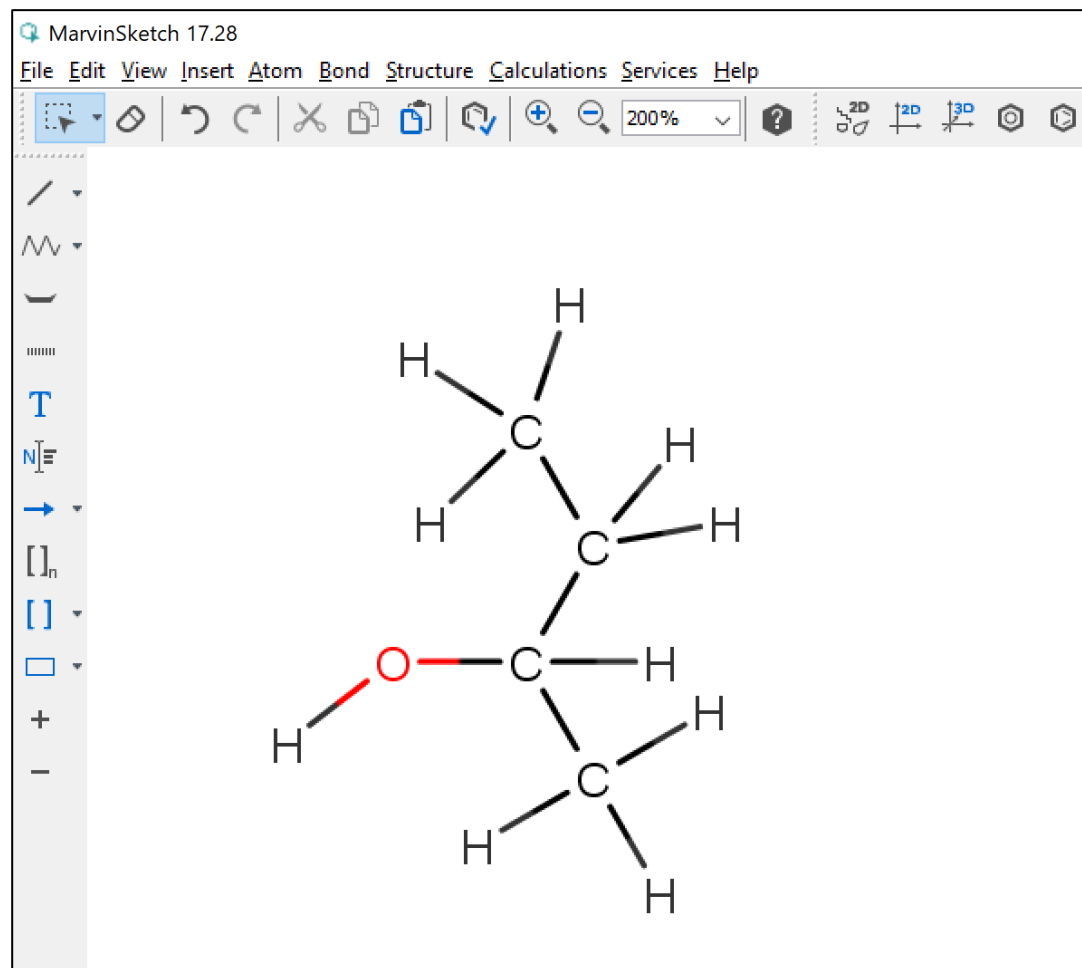
Tekstien muotoilut ovat mahdollisia, joskaan ei välttämättömiä. Tässä kohtaa voi määritellä sen, mihin oletusarvoisesti tekstiosiot lisätään.



MarvinSketch

Pedagogisia valintoja?

1. Viivakaava vai täydellinen rakennekaava?

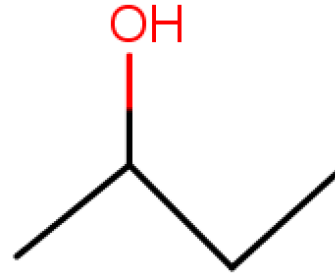


Joko viivakaava tai täydellinen rakennekaava?

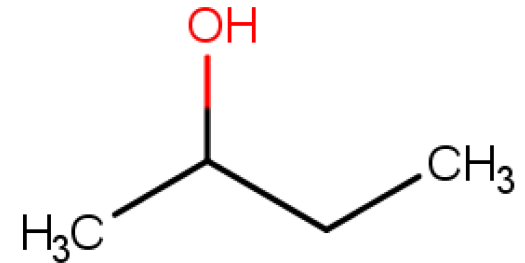
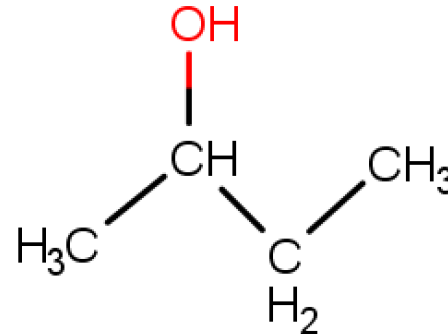
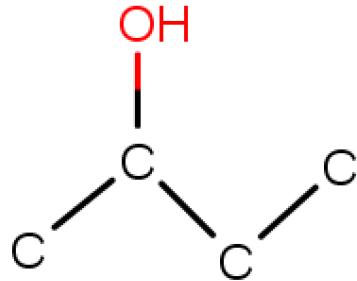
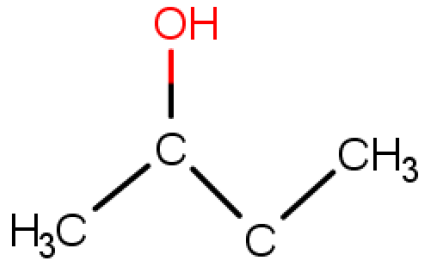
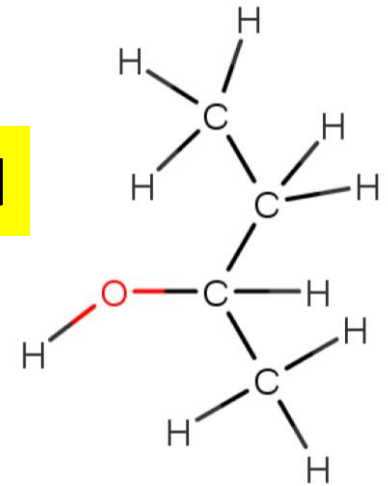


Joko viivakaava tai täydellinen rakennekaava

JOKO



TAI



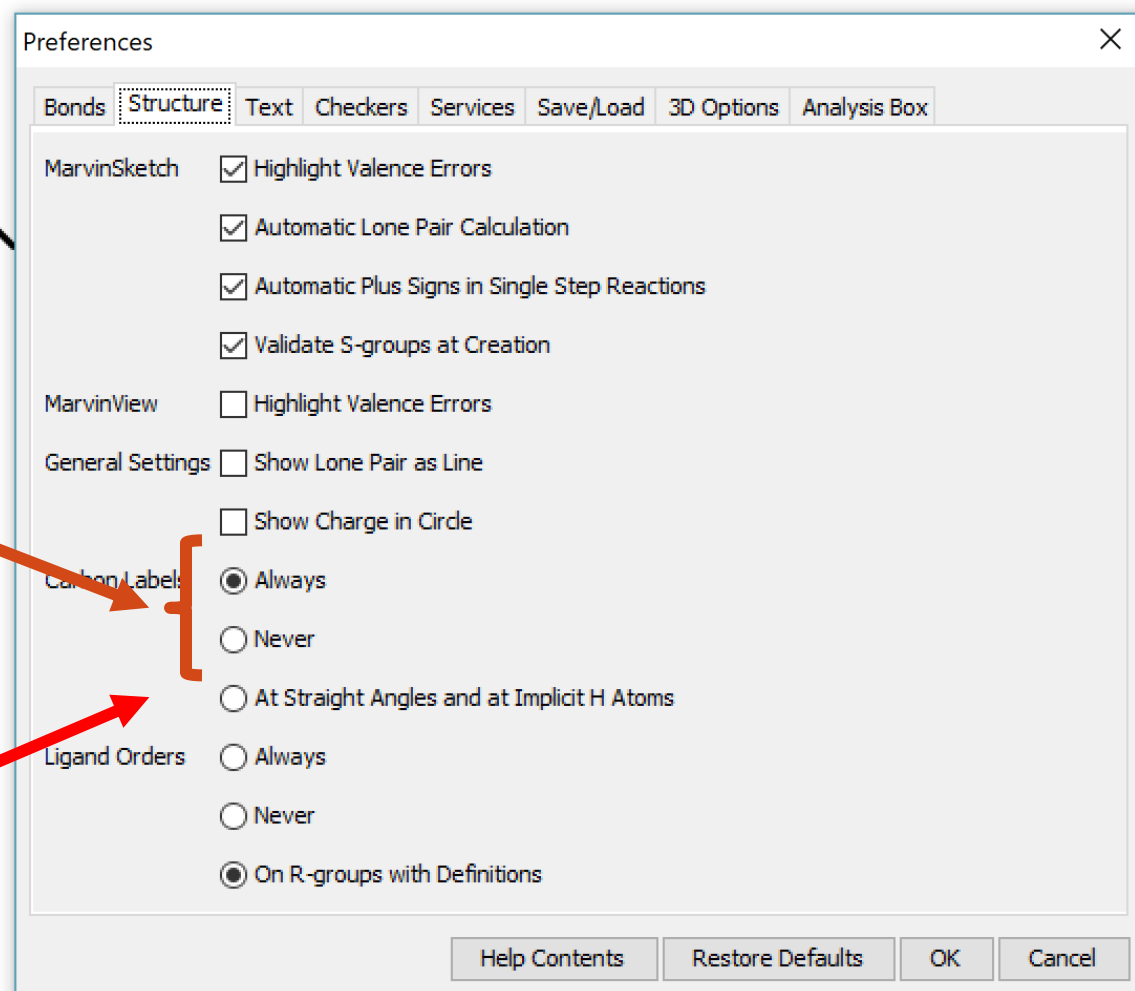
VAIHE 1: Hiilet näkeviin tai ei?



VAIHE1: Viivakaava tai täydellinen rakennekaava

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

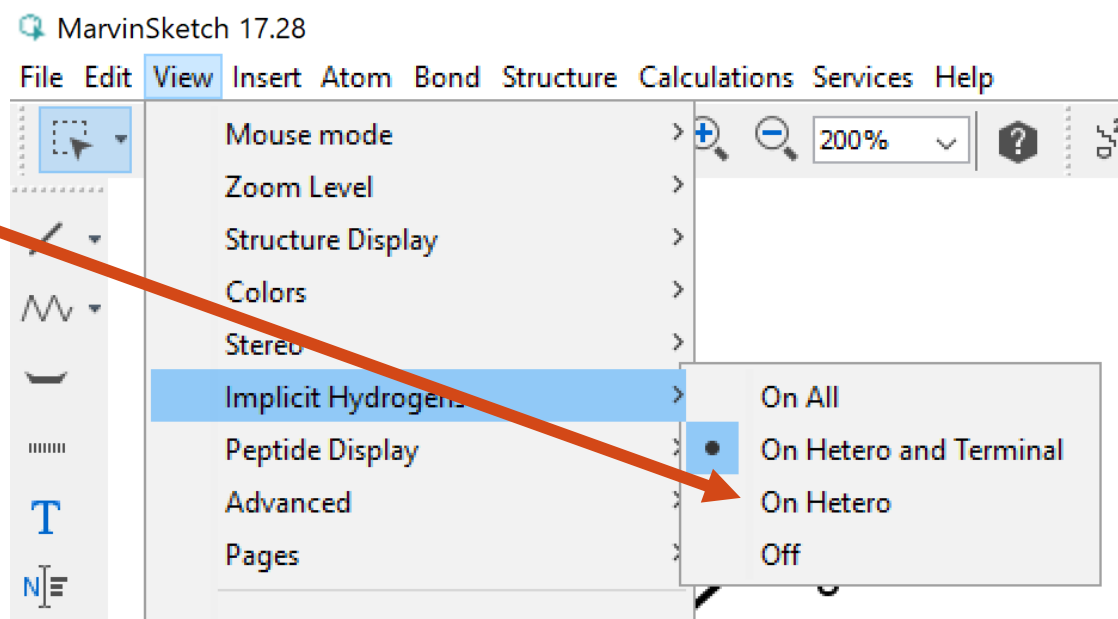
EI TÄTÄ



VAIHE 2: "Implisiittiset vedyt" pois



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

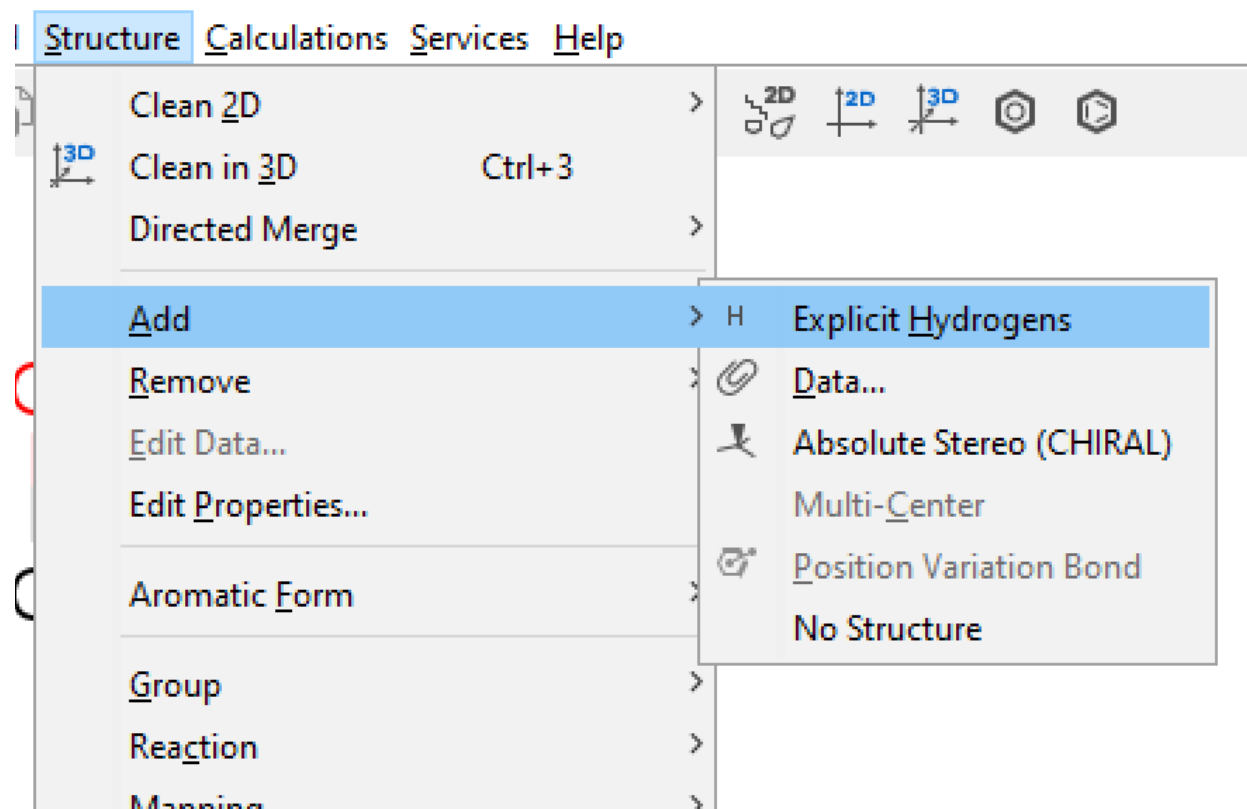


Vaihe 3: Jos täydellinen rakennekaava →



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

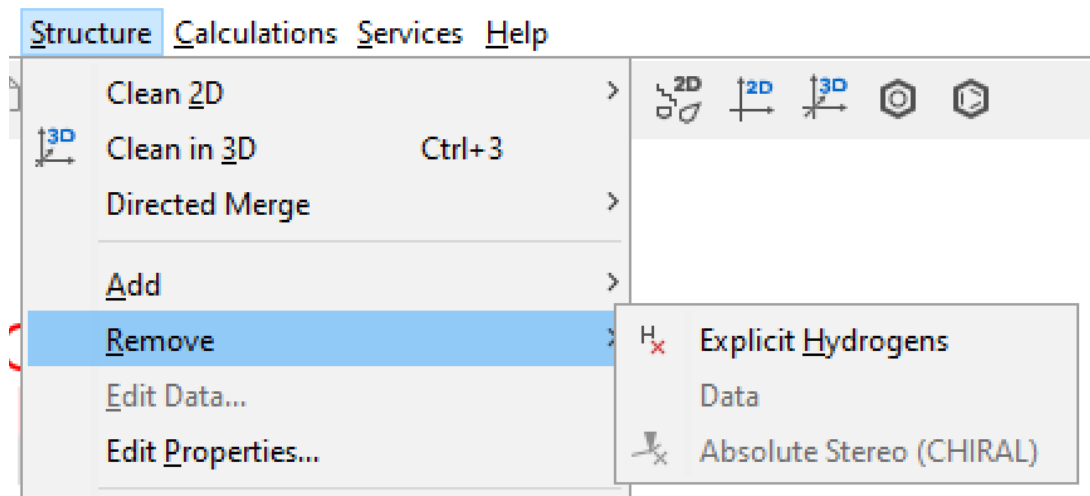
Structure-kohdasta **Add Explicit Hydrogens**



Paluu viivakaavaan?



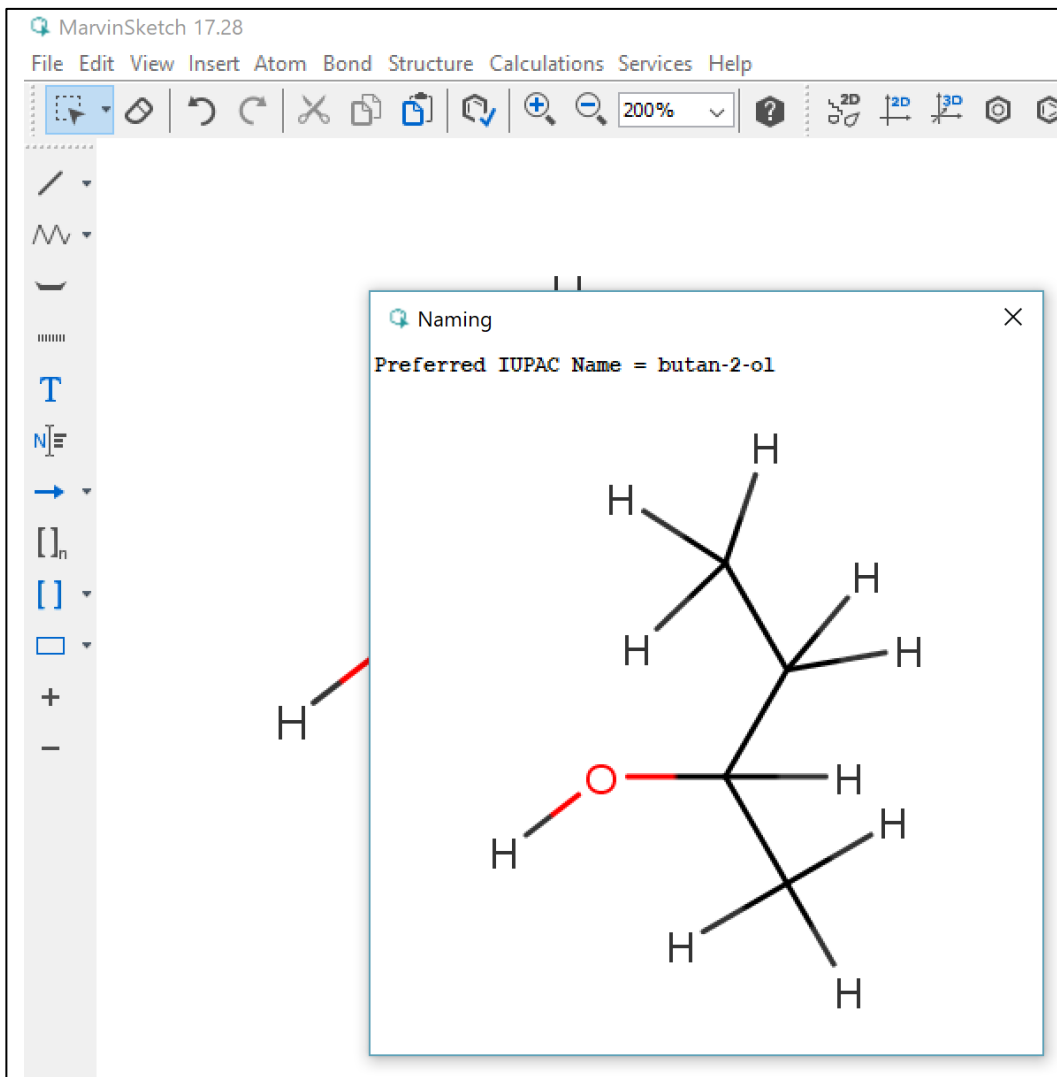
Jos haluaa palata viivakaavaesitysmuotoon. Poistetaan vedyt (viereinen kuva) ja poistetaan hiiliatomien merkinnät (Preferences –osiosta Carbon labels → Never)



MarvinSketch

Pedagogisia valintoja?

2. Nimeämisen opetus

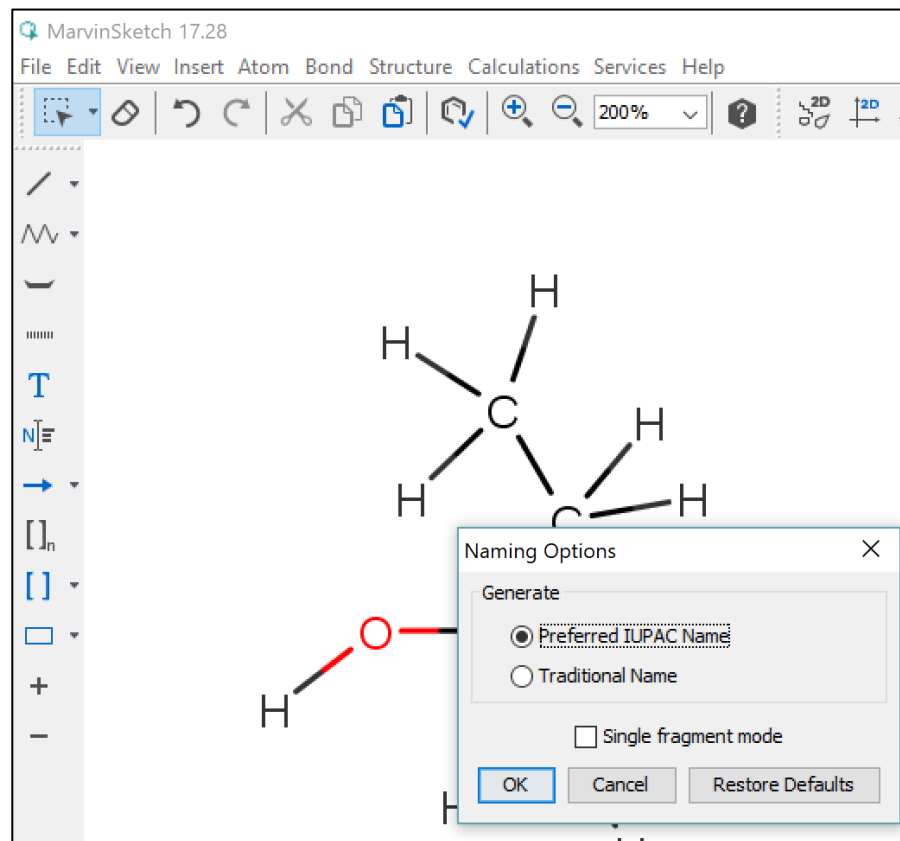


MarvinSketch nimeää molekyylit (myös Abitti-versiossa)



Miten kurssilla opetetaan orgaanisten molekyylien nimeäminen? Miksi?

MarvinSketch tuottaa nimet ja toisinpäin – nimestä rakenteen.



Vapaat elektroniparit



View Inset Atom Bond Structure Calculations Services Help

Mouse mode > [Zoom In] [Zoom Out] 200% [Help]

Zoom Level >

Structure Display >

Colors >

Stereo >

Implicit Hydrogens >

Peptide Display >

Advanced >

Pages >

Toolbars >

✓ Menubar F11

✓ Status Bar

Grid Shift+F9

Guidelines Ctrl+Shift+F9

Editor style >

Atom Numbering >

✓ Atom Properties

✓ Atom Mapping

Bond Lengths

Lone Pairs

✓ R-groups

R-Logic

✓ Valence

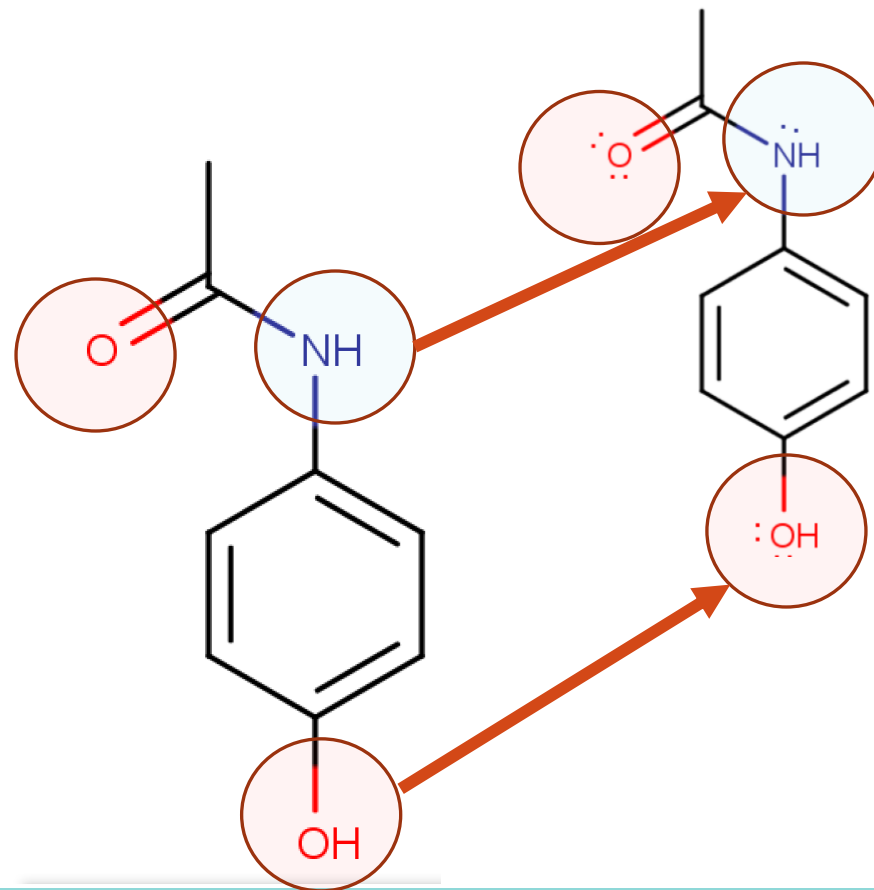
✓ Ligand Error

✓ S-group Attachments

VALITSE

Naming

Preferred IUPAC Name = N-(4-hydroxyphenyl)acetamide



Vapaat elektroniparit viivalla



Preferences

Bonds Structure Text Checkers Services Save/Load 3D Options Analysis Box

MarvinSketch Highlight Valence Errors
 Automatic Lone Pair Calculation
 Automatic Plus Signs in Single Step Reactions
 Validate S-groups at Creation

MarvinView Highlight Valence Errors

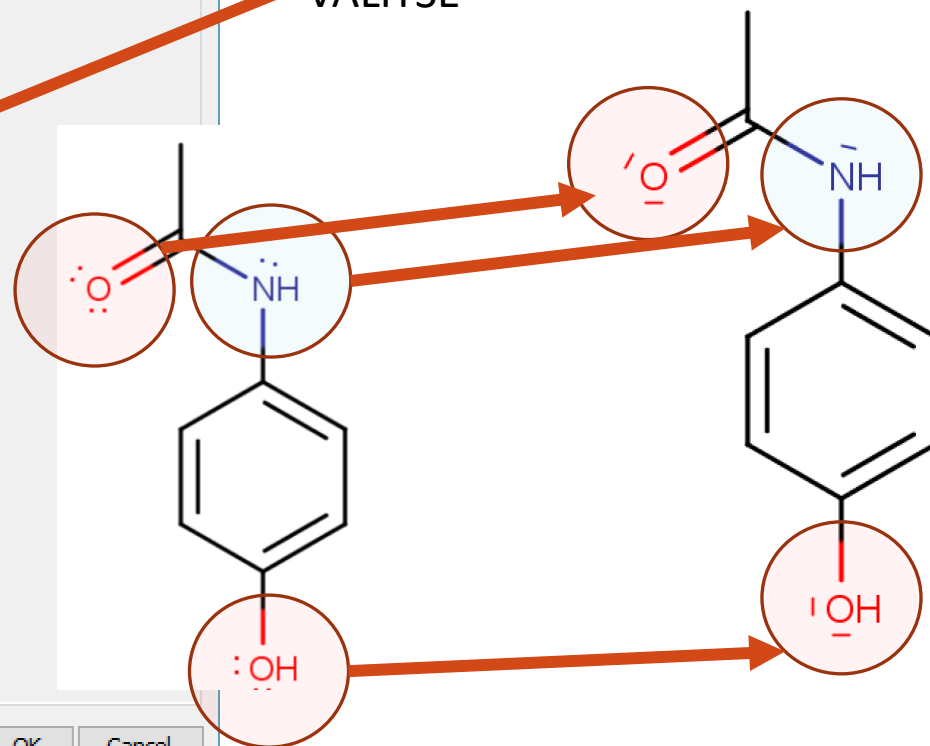
General Settings Show Lone Pair as Line
 Show Charge in Circle

Carbon Labels Always
 Never
 At Straight Angles and at Implicit H Atoms

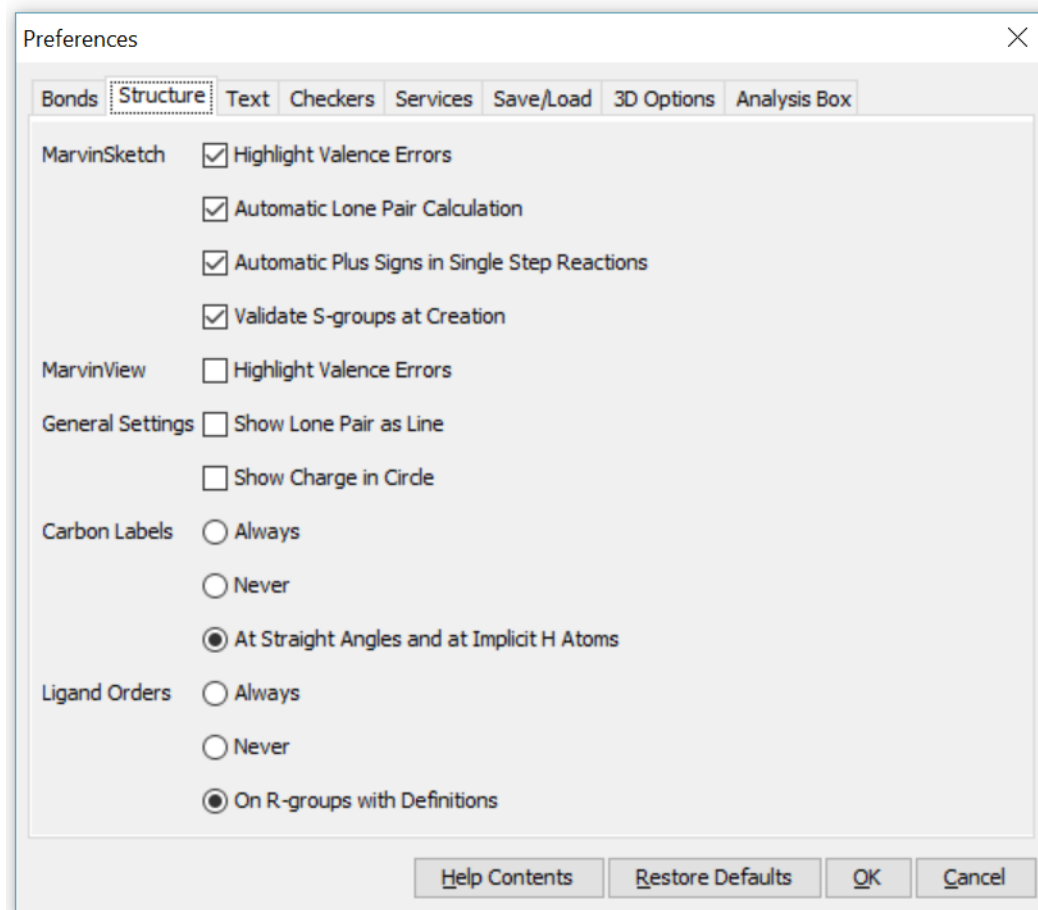
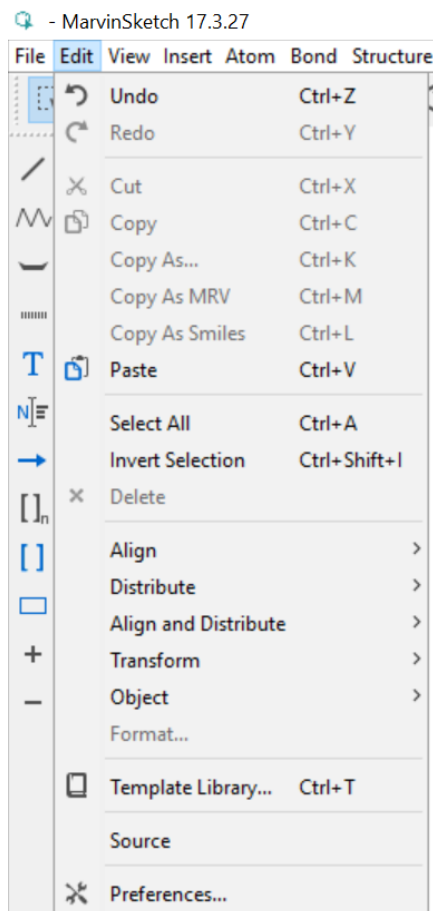
Ligand Orders Always
 Never
 On R-groups with Definitions

Help Contents Restore Defaults OK Cancel

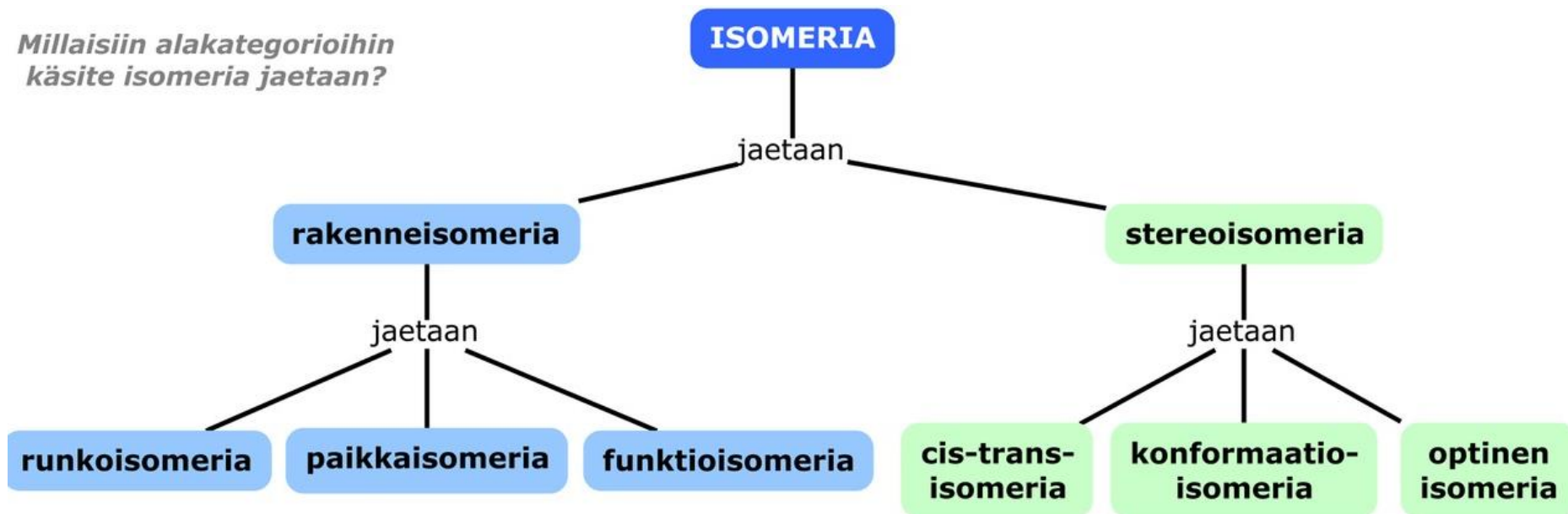
VALITSE



Valikot – Edit – Preferences...



*Millaisiin alakategorioihin
käsite isomeria jaetaan?*



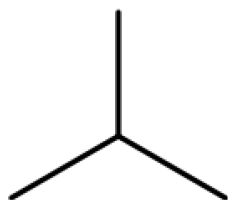
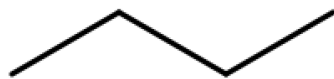
MarvinSketch ja isomeria

Isomerian opetus



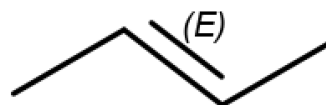
Hiilivedyt - funktionaaliset ryhmät: kaksoissidos, kolmoissidos, bentseenirengas

ALKAANIT



runkoisomeerejä

ALKEENIT



trans eli E

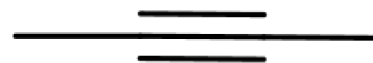


cis eli Z (Z)

cis-trans-isomeria

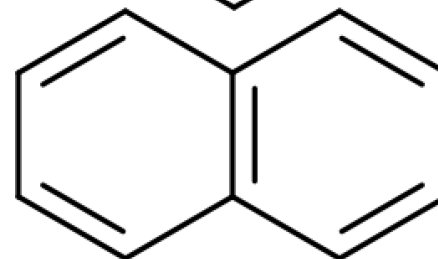
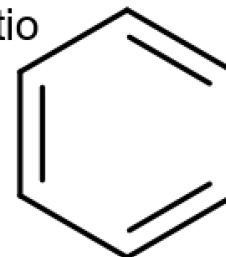
E/Z-isomeria

ALKYNYNI



sp-hybridisaatio

sp²-hybridisaatio



konformaatioisomeria (stereoisomeriaa):

sp³-hybridisoituneiden C-atomien sigma-sidos (sp³-sp³)

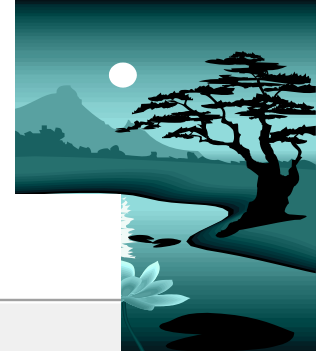
Stereoisomerian opetus ja MarvinSketch (Abittiversio)



- cis-trans-isomeria
 - MarvinSketch ei tunne cis-trans-isomeriaa, vaan **E/Z-isomerian**
 - trans → E = entgegen ja cis → Z = zusammen
- peilikuvaisomeria
 - Peilikuvaisomeria esiintyy R/S-isomerian kautta
 - R/S-jako ei kuulu lukion oppimäärään, mutta **ohjelma tunnistaa kiraaliset/asymmetriset hiiliatomit**

E,Z-nimeämistapaa käytetään kaksoissidoksia sisältävistä alkeeneista, kun yhdisteen rakenteen kuvaamiseen ei voida käyttää cis-trans-nimeämistapaa. E,Z-isomeriaa esiintyy alkeeneilla silloin, kun kaksoissidoksen hiiliin on liittynyt kolme tai neljä erilaista atomia tai atomiryhmää (jotka eivät ole vetyatomeja). Tällöin käytetään E,Z-nimeämistapaa, joka määräytyy kaksoissidokseen kiinnittyvien atomien tai substituenttien prioriteettijärjestyksen perusteella. Atomien prioriteettijärjestys määräytyy atomipainojen (järjestysluvun eli atomiluvun) mukaan. Jos painavimmat atomit (substituentit) ovat samalla puolella kaksoissidosta, on kysymyksessä Z-konfiguraatio, eri puolilla taas E-konfiguraatio.

E/Z-isomeriaa



MarvinSketch Fermium.5

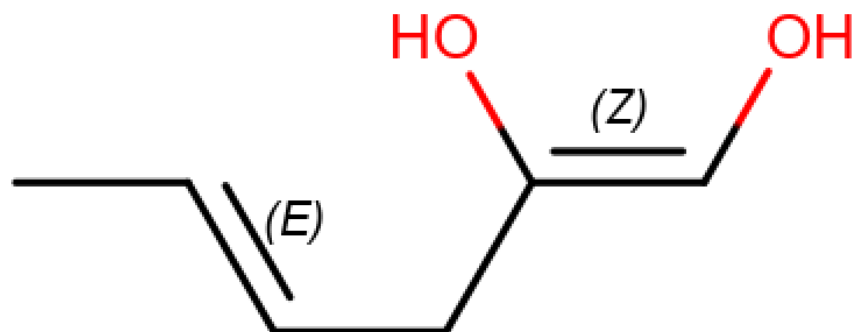
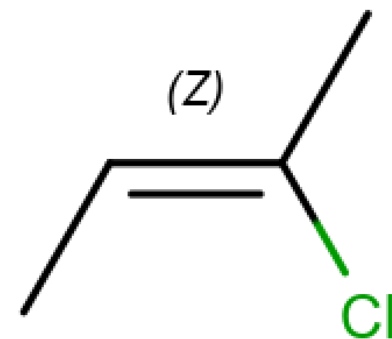
File Edit View Insert Atom Bond Structure Calculations Services Help

View menu options:

- Mouse Mode >
- Zoom Level >
- Structure Display >
- Colors >
- Stereo >**
 - R/S Labels >
 - E/Z Labels
 - M/P Labels
 - Absolute Labels
- Implicit Hydrogens >
- Peptide Display >
- Advanced >
- Pages >
- Toolbars >
- Menubar F11
- Status Bar
- Grid Shift+F9
- Guidelines Ctrl+Shift+F9
- Editor Style >

Toolbar options:

- Zoom: 200 %
- Help: ?
- Refresh: R



cis-trans vs. E/Z



MarvinSketch 19.2

File Edit View Insert Atom Bond Structure Calculations Services Help

The screenshot shows the 'View' menu in MarvinSketch 19.2. The 'Stereo' option is selected, and its sub-menu is open, showing the following options:

- R/S Labels
- E/Z Labels
- M/P Labels
- Absolute Labels

Other options in the 'View' menu include Transform, Zoom, Display, Colors, Implicit Hydrogens, Peptide Display, Misc, Pages, Periodic System... (Ctrl+E), Open MarvinView2D, Open MarvinView3D, Toolbars, Menubar (F11), Status Bar, Grid (Shift+F9), Guidelines (Ctrl+Shift+F9), Configurations, and Customize...

2-Butene.mrv - MarvinSketch 19.2

File Edit View Insert Atom Bond Structure Calculations Services Help

The screenshot shows the MarvinSketch 19.2 interface with the 2-Butene molecule. The molecule is shown in a skeletal structure with a double bond. The labels (Z) and (E) are placed below the molecule. The (Z) label is positioned below the left side of the double bond, and the (E) label is positioned below the right side of the double bond. The interface includes a toolbar with various icons and a zoom level of 200%.

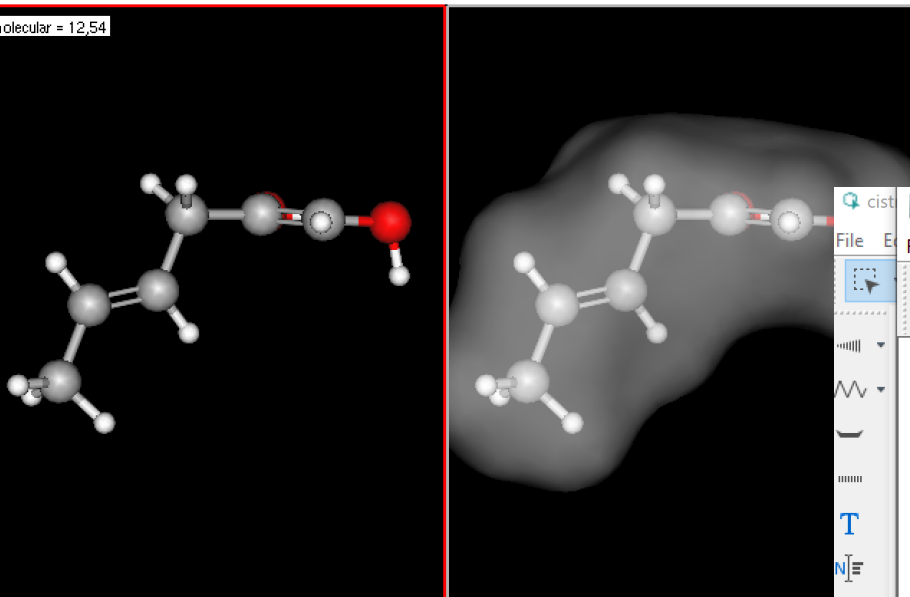
cis-trans- /E/Z-isomeria ja 3D



cistrans_isomeriaa.mrv - MarvinSketch Fermium.5

Polarizability

molecular = 12,54



Polarizability Options

Decimal places 2

Type

- Molecular
- Atomic

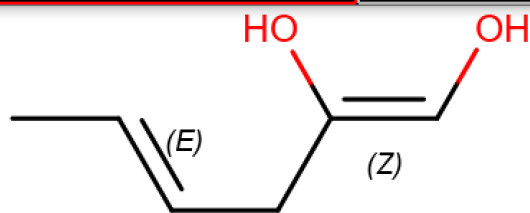
Fermium-versiolla tehty 3D

MarvinSpace

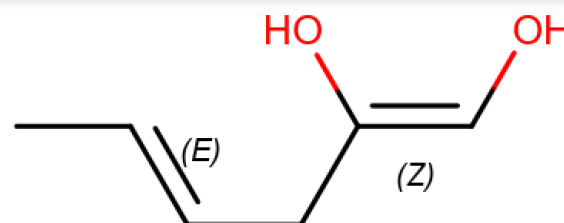
File Edit Display Show Animation Layout Alignment Help

1A 60° -15°

Ligand



Abitti-versiolla ja uudemmalla tehty 3D



Peilikuvaisomeriaa ja piirtäminen



MarvinSketch Fermium.5

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

Mouse Mode > [Zoom: 200%] [Help] [Refresh]

Zoom Level >

Structure Display >

Colors >

Stereo >

- R/S Labels > All Possible
- E/Z Labels
- M/P Labels
- Absolute Labels

Implicit Hydrogens >

Peptide Display >

Advanced >

Pages >

Toolbars >

Menubar F11

Status Bar

Grid Shift+F9

Guidelines Ctrl+Shift+F9

Editor Style >

Double

Triple

Aromatic

Single Up

Single Down

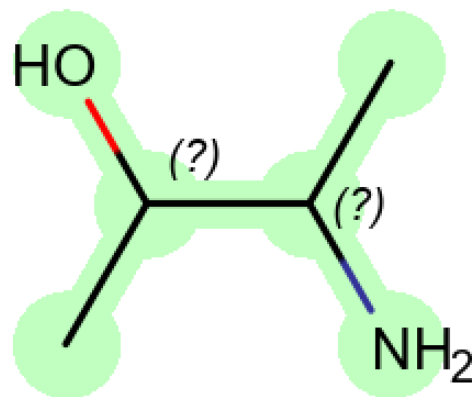
Single Up or Down

Double Cis or Trans

HO (R) NH₂

HO (S) NH₂

Atomi tai atomiryhmä on tasosta ylöspäin tai alaspäin



Isomerian opetus?



Tuorein Abitti-versio MarvinSketch-ohjelmasta antaa sekä peilikuva- että cis-trans (E/Z)-isomeerien molekyylin kuvat

MarvinSketch 21.9

File Edit View Insert Atom Bond Structure Calculations Services Help

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

OH

Tautomers
Stereoisomers
Resonance

Stereoisomers Options

Generate

- tetrahedral stereo isomers
- double bond stereo isomers
- both

Generate all stereoisomers

Generate maximum 1000

Protect tetrahedral stereo centers

Protect double bond stereo

Filter invalid 3D structures

Display in 3D

OK Cancel Restore Defaults

Stereoisomers

File Edit View Table Structure Tools Help

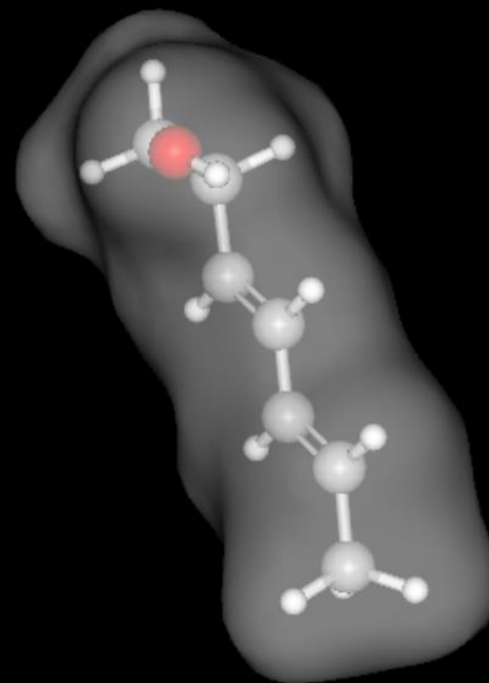
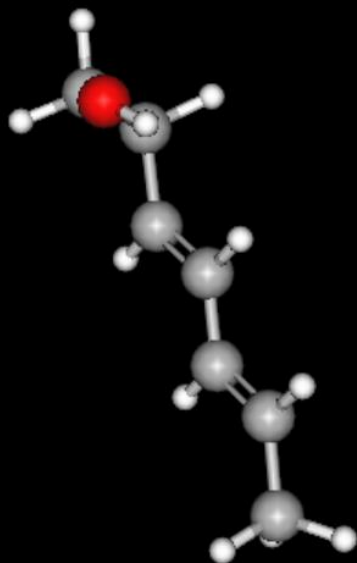
1 2

3 4

Select

Lisäksi ohjelma antaa merkitä kiraaliset (asymmetriset) hiilet ja isomeriaa sisältävät kaksoissidokset

molecular = 13,77



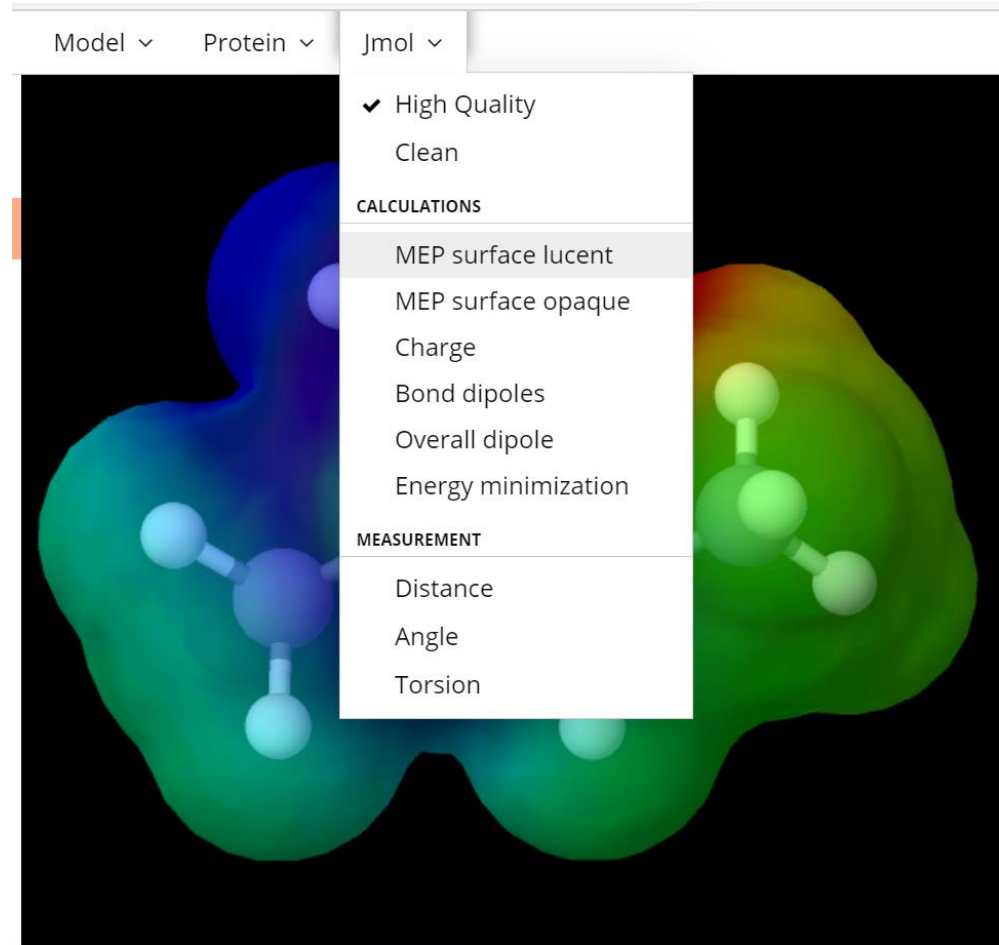
MarvinSpace – 3D

Molekyylien 3D-mallintaminen



Orgaanisten molekyylien 3D-mallintaminen on ollut jo pitkään mahdollista eri ohjelmilla.

Yläkouluissa ja lukion kemian pakollisilla kursseilla on laajasti käytössä **Molview.org –palvelu**. Se on monella tapaa edelleen käytännöllinen, erityisesti poolisuuden opetuksessa.



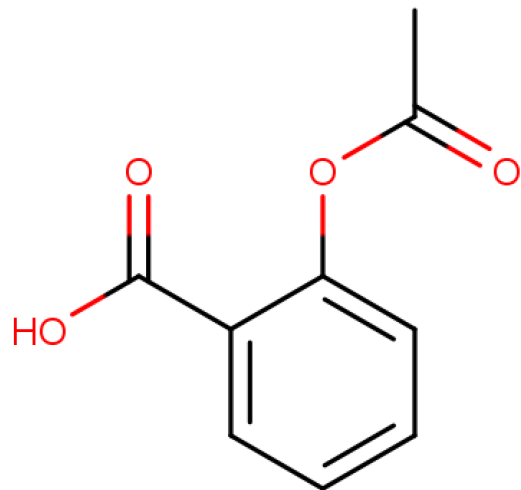
Molekyylin 3D-kuvan avaaminen



MarvinSketch 21.20

File Edit View Insert Atom Bond Structure Calculations Services Help

200 %



Polarizability Options

Decimal places: 2

Type: Molecular Atomic

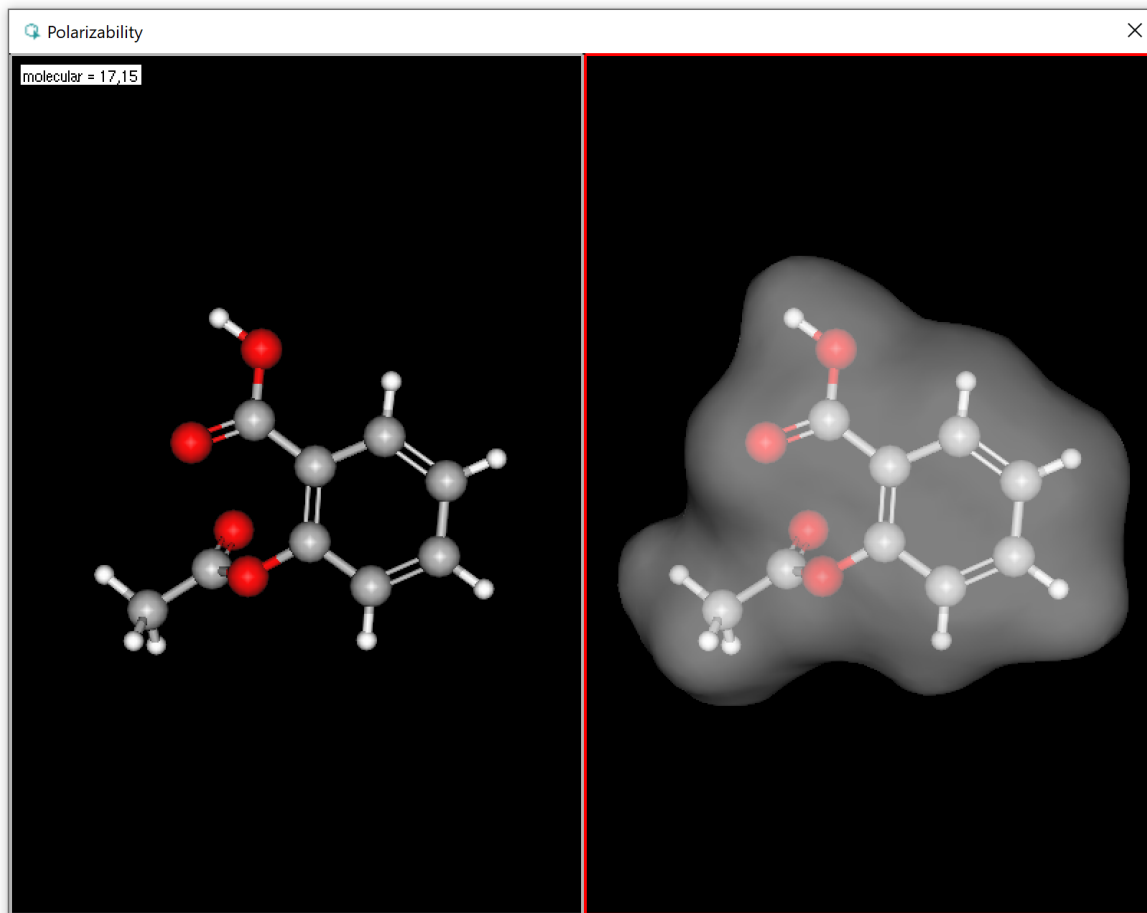
Take 3D geometry (Thole)

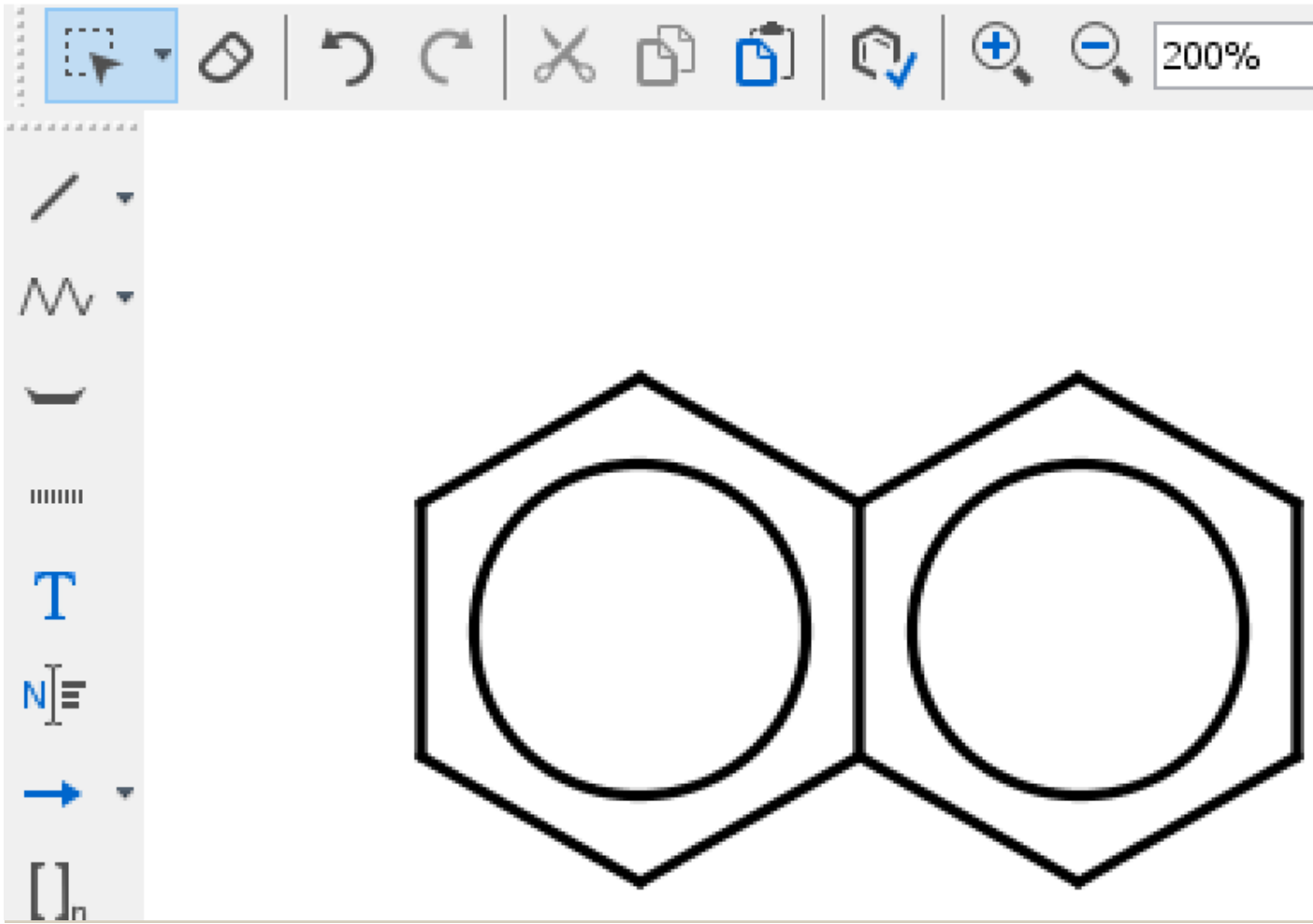
Take major microspecies

at pH: 7.4

Display in MarvinSpace

OK Cancel Restore Defaults



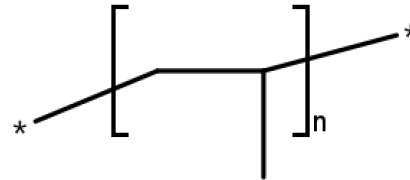
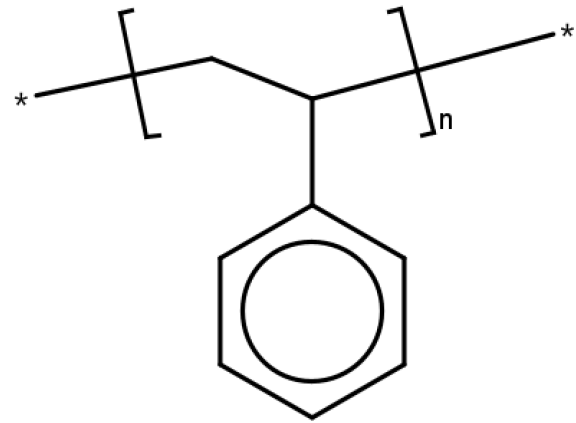


Erilaiset yhdisteet

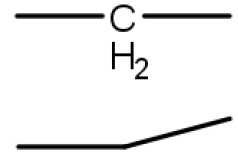
Polymeerit



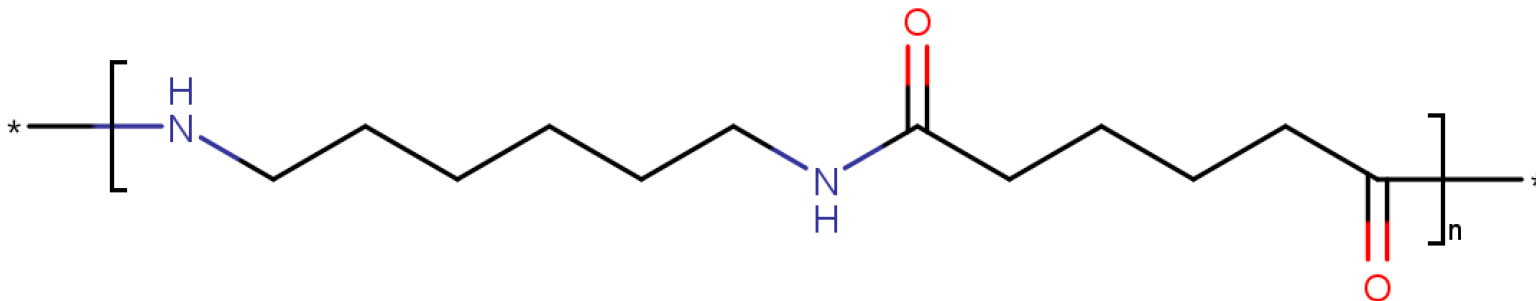
ADDITIOPOLYMEEREJÄ



Jos hakasulkeet haluaa pystysuoraan, piirretään tähdiksi muuttuvat sidokset (hiilet) vaakasuoraan. Sen jälkeen voi taittaa ne. Samalla myös hiilen merkki ja vedyt katoavat (suorassa viivassa näyttävät, että välissä on atomi).



KONDENSAATIOPOLYMEEREJÄ

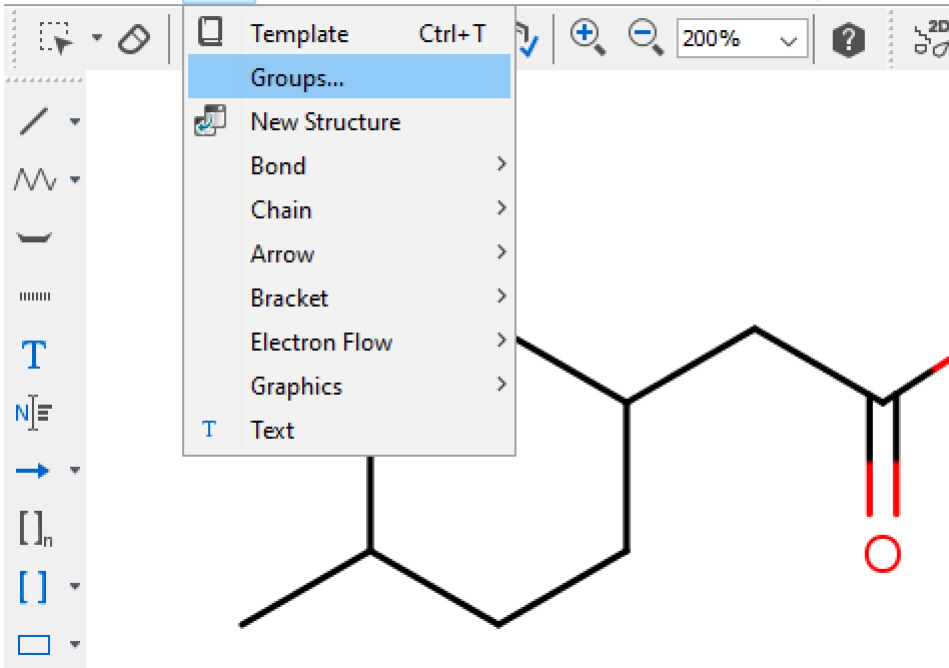


Orgaaniset suolat



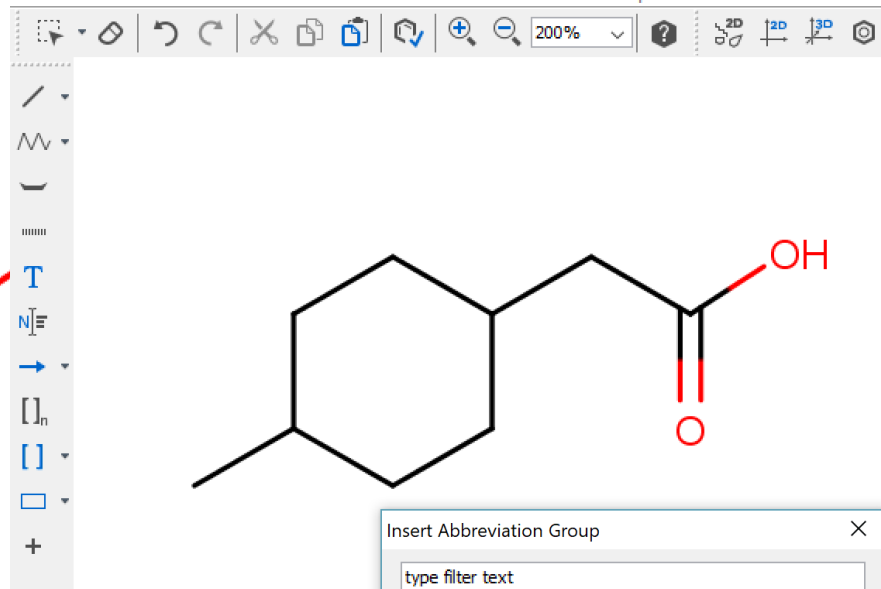
MarvinSketch 17.28

File Edit View Insert Atom Bond Structure Calculations Services Help



MarvinSketch 17.28

File Edit View Insert Atom Bond Structure Calculations Services Help



Insert Abbreviation Group

type filter text

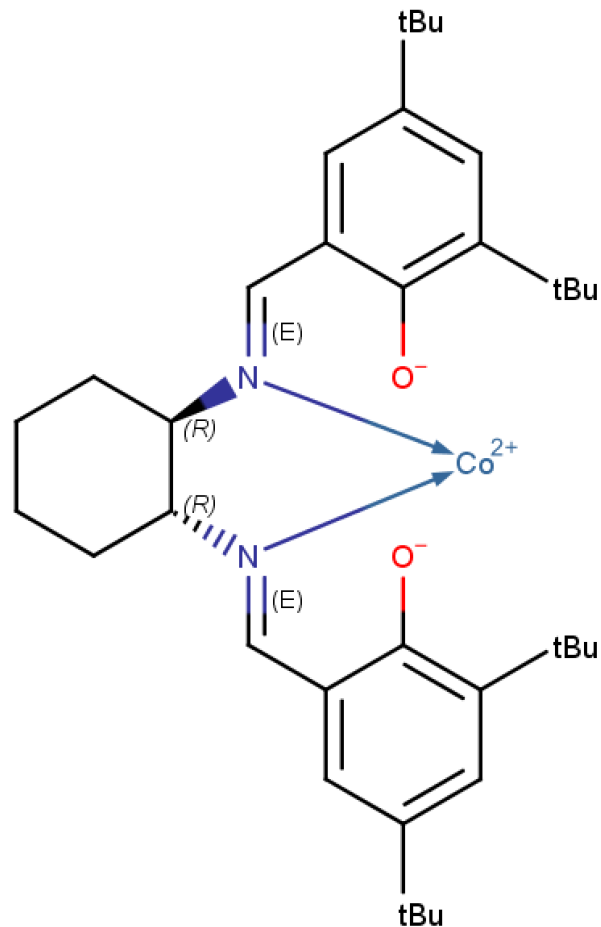
- OM
- ON
- ON
- On-Am
- On-Bu
- On-Pr
- ONa
- Oneo-Am
- OneoAm
- ONO2
- ONp
- OnPr

Close


Kompleksiyhdiste

MarvinSketch 19.2

File Edit View Insert Atom Bond Structure Calculations Services Help







The image shows a software menu with the following items:

- Clean 2D
-  Clean in 3D Ctrl+3
- Directed Merge

- Add** (highlighted)
- Remove
- Edit Data...
- Edit Properties...

- Aromatic Form

The 'Add' menu is open, showing the following options:

-  Explicit Hydrogens
-  Data...
-  Absolute Stereo (CHIRAL)
- Multi-Center
-  Position Variation Bond
- No Structure

Valikot

Valikot - View



MarvinSketch 17.3.27

File Edit **View** Insert Atom Bond Structure Calculu

- Mouse mode
- Zoom Level
- Structure Display
- Colors
- Stereo
- Implicit Hydrogens
- Peptide Display
- Advanced
- Pages
- Toolbars
- Menubar F11
- Status Bar
- Grid Shift+F9
- Guidelines Ctrl+Shift+F9
- Editor style

MarvinSketch 17.3.27

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

- Atom Symbols in 3D
 - Wireframe
 - Wireframe with Knobs
 - Stick
 - Ball and Stick
 - Spacefill
- Atom Numbering
 - Off
 - Atom Numbers
 - IUPAC Numbering
- Atom Properties
- Atom Mapping
- Bond Lengths
- Lone Pairs
- R-groups
- R-Logic
- Valence
- Ligand Error
- S-group Attachments

Valikot – View – Sidospituus



MarvinSketch 17.4.3

File Edit View Insert Atom Bond Structure Calculations Services Help

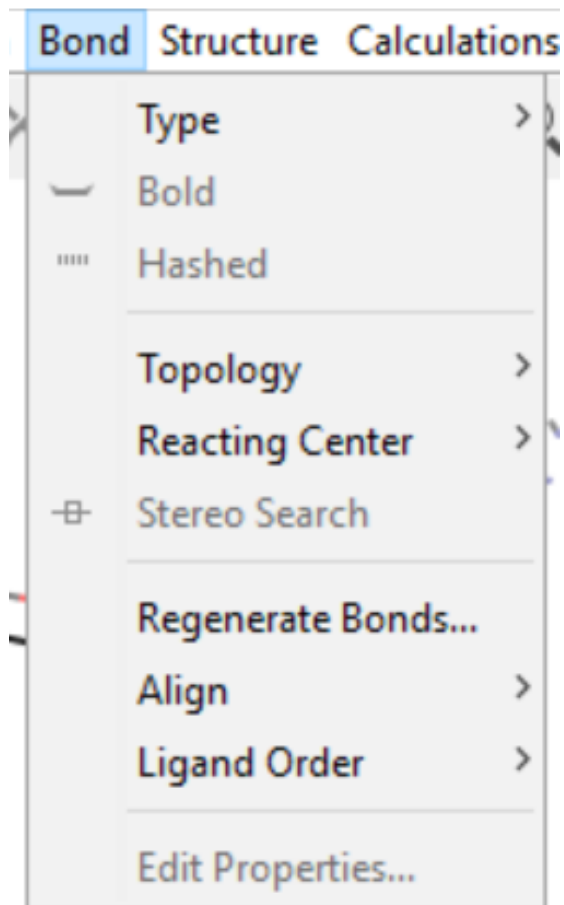
The screenshot shows the MarvinSketch 17.4.3 interface. The 'View' menu is open, and 'Bond Lengths' is selected. The chemical structure of 3-aminobutan-2-ol is shown with the following bond lengths:

- C-N: 1.47
- C-C (top): 1.55
- C-C (middle): 1.56
- C-C (bottom): 1.55
- C-O: 1.43

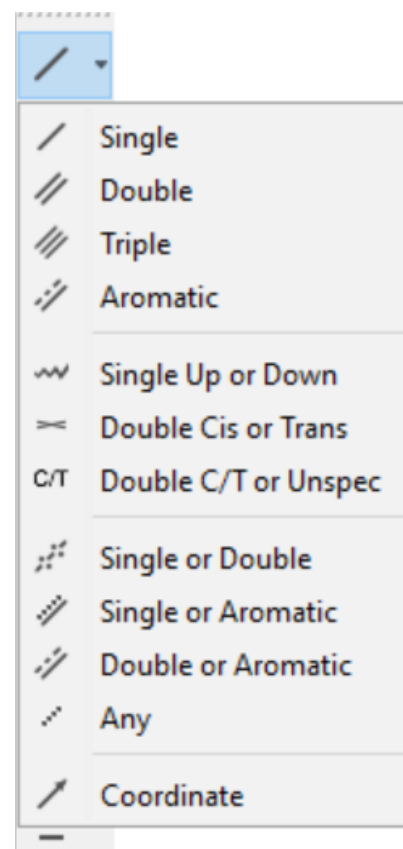
The structure also shows an amino group (H₂N) and a hydroxyl group (OH). An orange arrow points to the C-N bond.

Name: 3-aminobutan-2-ol
Molecular weight: 89,14
Formula: C₄H₁₁NO

Valikot - Bond



Vasen reuna



Valikot – Calculations



Calculations Services Help

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

Elemental Analysis Options

Type

- Molecular weight
- Exact molecular weight
- Formula
- Dot-disconnected formula
- Mass spectrum
- Composition
- Atom count

Recognize formula in pseudo labels

Use D / T symbols for Deuterium / Tritium

Single fragment mode

OK Cancel Restore Defaults

Elemental Analysis

Molecular weight: 74,123
Exact molecular weight: 74,073164942
Formula: $C_4H_{10}O$
Dot-disconnected formula: $C_4H_{10}O$
Composition: C (64,82%), H (13,6%), O (21,58%)
Atom count: 15
Mass spectrum [m/z: relative abundance]:
74: 1.00 75: 0.04

74 75

Valikot – Calculations - Charge



Bond Structure **Calculations** Services Help

- Elemental Analysis
- Protonation
- Partitioning
- Solubility
- Charge**
- NMR
- Isomers
- Conformation
- Geometry
- Other

Charge Options

Decimal places: 2

Type: Total

Charges of implicit hydrogens

Take resonant structures

Take major microspecies

at pH: 7.4

Display in MarvinSpace

OK Cancel Restore Defaults

Charge

Atom	Charge
Carbon 1	0,02
Carbon 2	-0,06
Carbon 3	0,02
Carbon 4	0,03
Carbon 5	-0,03
Carbon 6	0,05
Carbon 7	0,06
Carbon 8	0,03
Carbon 9	-0,04
Carbon 10	0,03
Carbon 11	0,03
Oxygen 1	0,21
Oxygen 2	-0,39

Lisää aineistoa - videoita



<https://peda.net/p/marikasuovanen/ohjevideoita>