



# MarvinSketch

22.9.2022

---

**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)

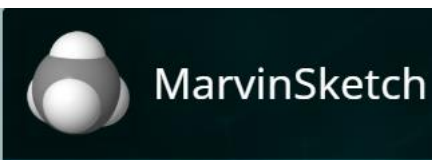
- MarvinSketchin asentaminen ja lisenssi
- MarvinSketch-ohjelman eri versiot
- Molekyylien piirtäminen, perusasetukset

## • 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



Oppimateriaalit > Kemian materiaalit > MarvinSketch

MarvinSketch	^
Ajankohtaista	
MarvinSketchin ominaisuudet	
Koulutukset	▼
Ohjeet	▼
Tutkimus: MarvinSketchin	

## MarvinSketch

Osta (0€)

MarvinSketch -kirja lukion käyttöön

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

[bit.ly/marvinsketch](https://bit.ly/marvinsketch)

Tämän sivuston tavoitteena on tarjota tukea kemian opettajien MarvinSketch-käyttöönololle. Sivustolta löydät mm.

- Orbitaali - MarvinSketch sähköisen oppikirjan (linkki yllä) - kirjan päivittäminen käynnissä,

### Twitter-koonti

Twitatakaa hashtagilla [#marvinsketchsuomi](#).

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

[#marvinsketchsuomi Tweets](#)

2.painos julkaistu 31.3.2022

# Orbitaali - MarvinSketch II

Lukion kemian molekyylihallinnuksen oppikirja

Myllyviita > Orbitaali - MarvinSketch II

Orbitaali - MarvinSketch II



Lukijalle



1. MarvinSketchin  
asentaminen



2. Käytön aloittaminen



## 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.

### Orbitaali - MarvinSketch II

Tämä kirja on uudistettu versio aiemmasta Orbitaali - MarvinSketch -kirjasta. Kirjaan on lisätty toiminnallisia videoita

e-Oppi: Orbitaali - MarvinSketch  
Ohjeita ohjelman käytöstä lukiolaisille ja opettajille  
2.painos

# 2.painos ilmestynyt Orbitaali – MarvinSketch -kirjasta



2.painos julkaistaan 31.3.2022

## Orbitaali - MarvinSketch II

Lukion kemian molekyyllimallinnuksen oppikirja

Olet sivulla roolissa: Ylläpitäjä

Ari Myllyviita > Orbitaali - MarvinSketch II

Orbitaali - MarvinSketch II	^
Lukijalle	v
1. MarvinSketchin asentaminen	v
2. Käytön aloittaminen	v

## Tervetuloa Mar

### Kirjan sisältö

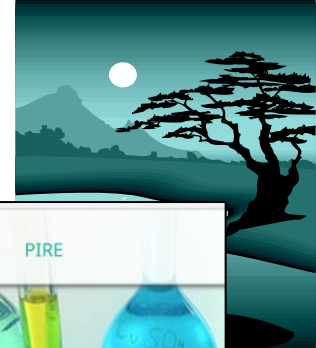
Kirja soveltuu lukion kemian opetukselle (opetuskurssilla), joissa MarvinSketch -ohjelman käyttö on mielekästä ja tukee lukion kemian opiskelua.

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 elektronitiheydet.

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 Taiwanin – 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-koee – 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 molekyylihallinnusohjelmasta osana Abitti-koejärjestelmää ja osana tulevaa sähköistä kemian ylioppilaskoetta. Kouluissa oli pitkään ollut käytössä ChemSketch-niminen (mm. Mooli-nimisen oppikirjan rompullakin jaettu) 3D-molekyylihallinnusohjelma. Monen harmiksi tämä ei sitten tullut Abittiin mukaan. Kouluissa on ollut käytössä laajasti Molview.org-sivuston molekyylihallinnusohjelma, 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.

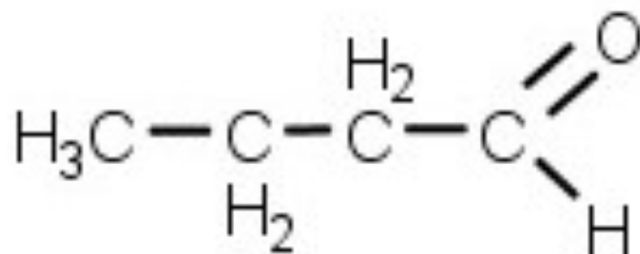
On hyvä määritellä lukiolaisten kanssa ne asiat, joita itse ylioppilaskirjoituksessa käytetään ja mitkä liittyvät mielekkääseen kemian rakenteiden opiskeluun.

#### *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

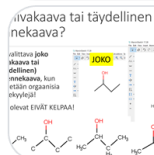
5 kommenttia

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".





SlapCount_game_rulebook	30.7.2020 20.44	Microsoft Edge PDF ...	1 513 kt
SlapCount_game1	30.7.2020 20.43	Microsoft Edge PDF ...	41 682 kt
Rule18_game2	30.7.2020 20.42	Microsoft Edge PDF ...	159 kt

- Rule18\_game1
- Link\_game\_rulebook
- RareEarthElements\_game\_rulebook
- RareEarthElements\_game1
- Link\_game1
- Complex\_game\_rulebook
- Complex\_game1
- SearchKey\_game1

License warning

**Oops! You don't seem to have a valid license...**

For information on how to proceed please [visit our website.](#)

If you have a valid license, check that it is installed in the License Manager.

Install licenses...

Close

# 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 **edellytti lisenssiä** (kts. seuraava dia), minkä vuoksi vanhemmilla Abitti-versioilla ei saanut tätä toimintoa
- Uudet versiot eivät sisällä merkittäviä lisätoimintoja tai uusia ominaisuuksia

# Ohjelman lataaminen

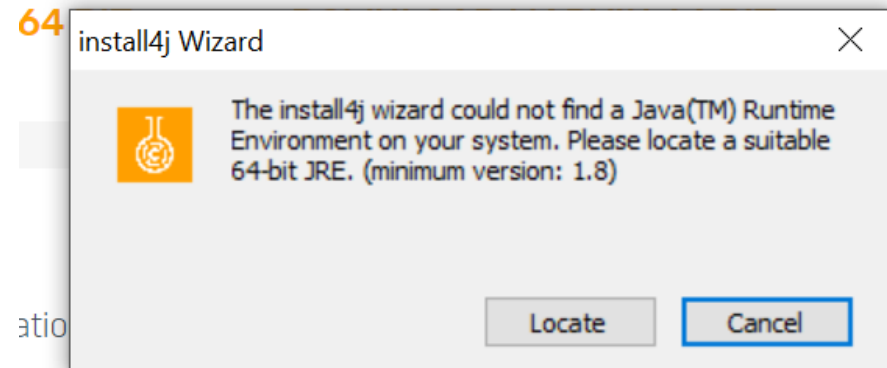


## Eri käyttöjärjestelmät?

- 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**

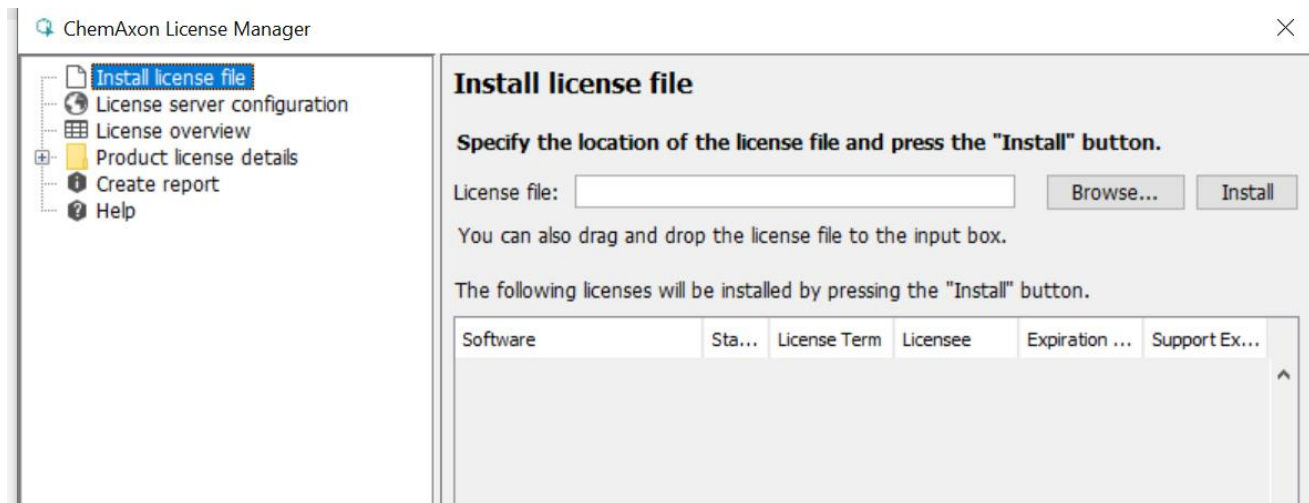
**DOWNLOAD MARVIN WITH OPENJDK REDHAT**

**DOWNLOAD MARVIN FOR DEBIAN**

**DOWNLOAD MARVIN FOR REDHAT**

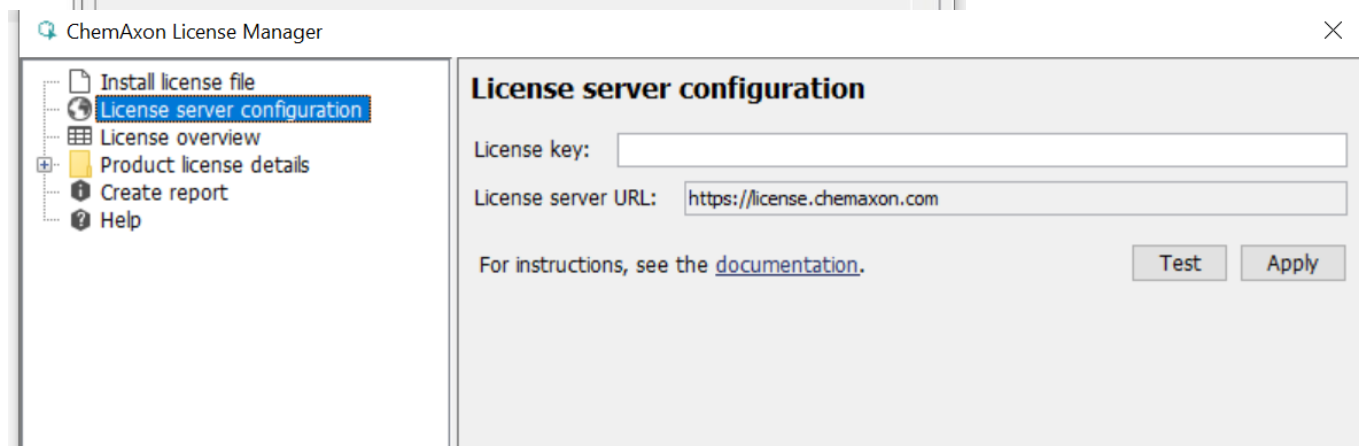
**SHOW OLDER VERSIONS**

# Lisenssin lisääminen asennettuun MarvinSketch-ohjelmaan



TIEDOSTO  
(aiemmat versiot)

AVAIN (KEY)  
(aiemmat versiot)



# Lisenssiavaimen jakaminen



1. Avataan lisenssikohta  
(kun on kirjaututtu  
sivustolle)

2. Poimitaan lisenssiavain

A screenshot of a web browser displaying the Chemaxon account page. The browser's address bar shows the URL 'https://account.chemaxon.com/licenses'. Below the browser, the Chemaxon logo is visible. The main content area features the text 'Your license key' above a white box containing the alphanumeric string 'lk\_79bd66d6f4f74ad3a08ad0c0acd584b0'. To the right of this string is a purple button labeled 'COPY KEY'. On the right side of the page, a user profile menu is open, showing options for 'Profile', 'Licenses', 'Settings', and 'Logout'. Two red arrows are overlaid on the image: one points from the 'Licenses' menu item to the 'Your license key' text, and the other points from the '1. Avataan lisenssikohta' instruction to the 'Licenses' menu item.

3. Poimitaan koodi ja jaetaan se lukiolaisille.

# 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

ChemAxon License Manager

Look in:

Viimeisim...

## 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.cxd

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

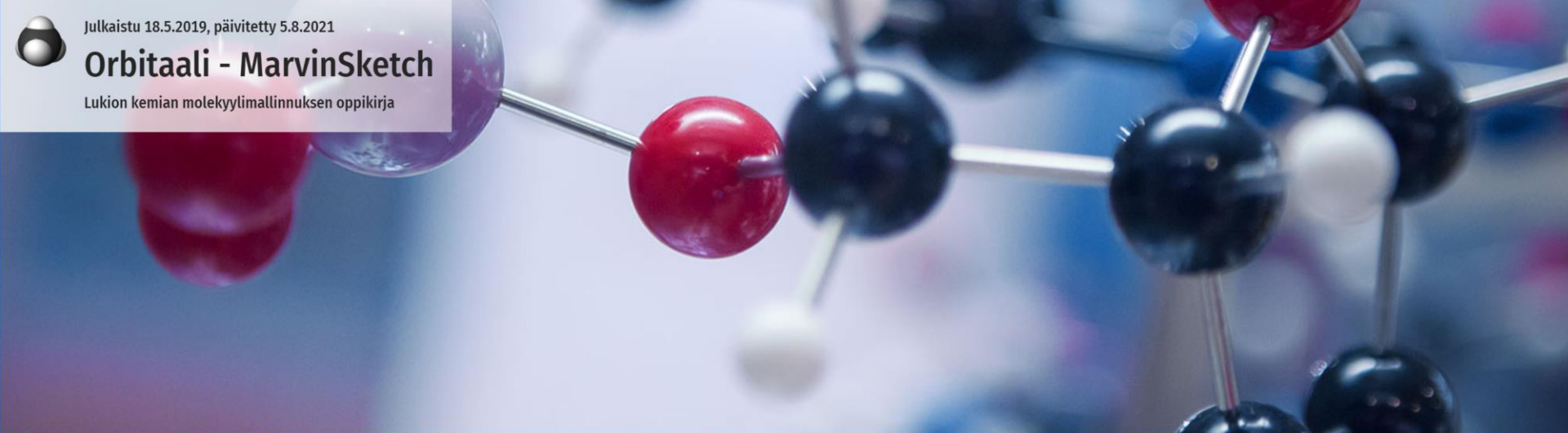
Asentamisen jälkeen:



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



### 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 MarvinSpace –ohjelman kohtalo



# MarvinSketch-ohjelmaversioiden valinta



<b>Huomioitava asia</b>	<b>MS-versio</b>	<b>Toimenpiteitä?</b>	<b>Mistä löytää</b>
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

Transform > 200 % ? 2D

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

CC(O)C

Marvin

Marvin v5.0

• View Mode

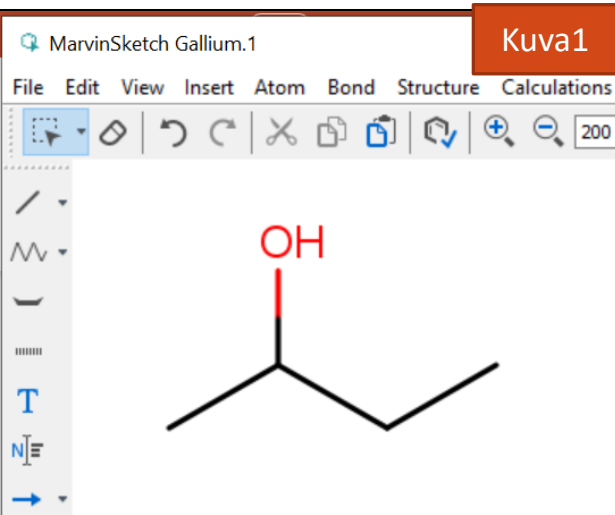
Reset Current Configuration

Configuration Settings...

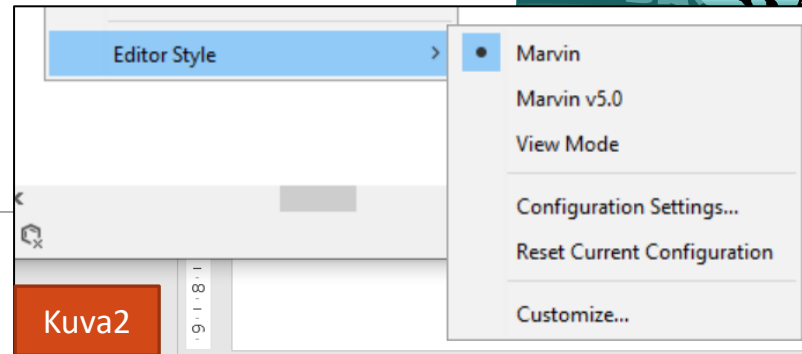
# MarvinSpace Abittiversiossa



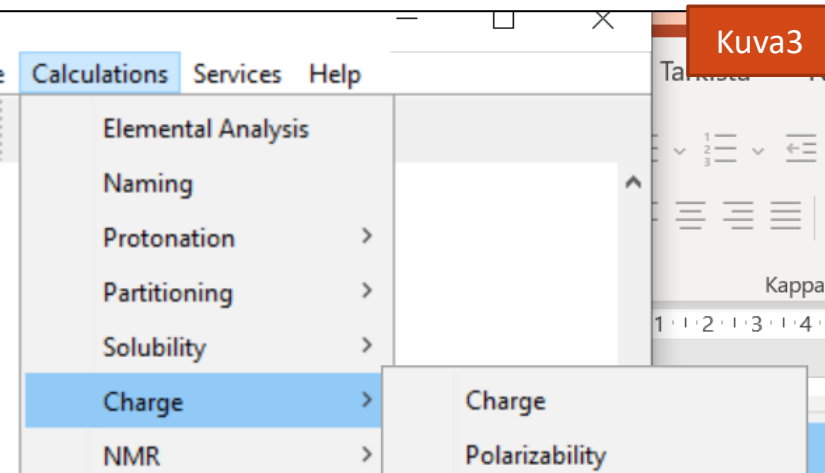
1. Piirretään ensin molekyyli (kuva1)



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

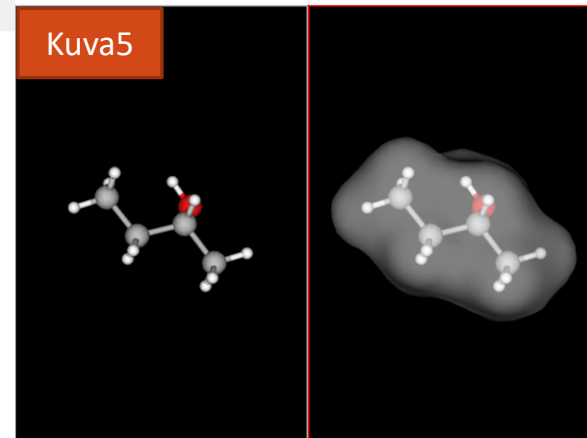
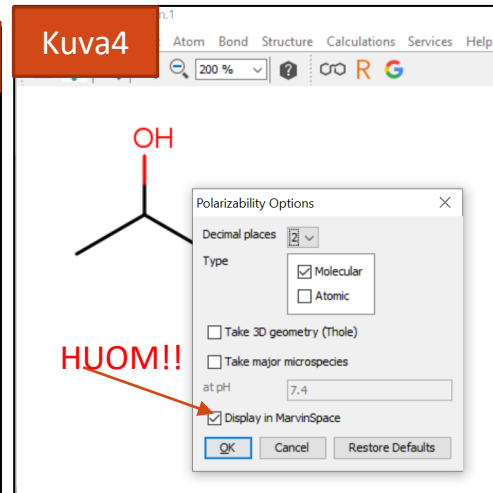


3. View Modessa **valitaan** Calculations –alasvetovalikosta Charge –kohdasta Polarizability (kuva3).

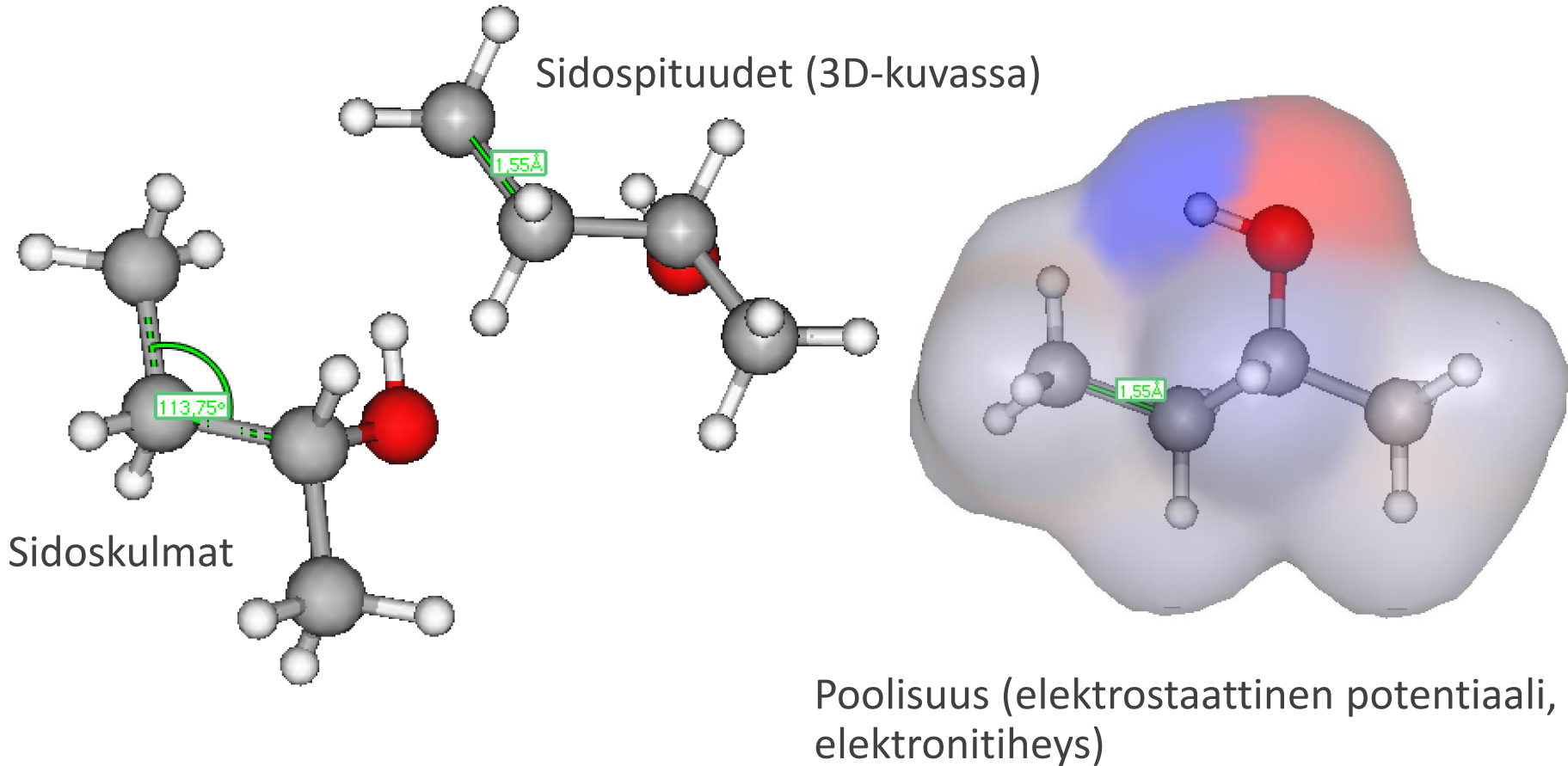


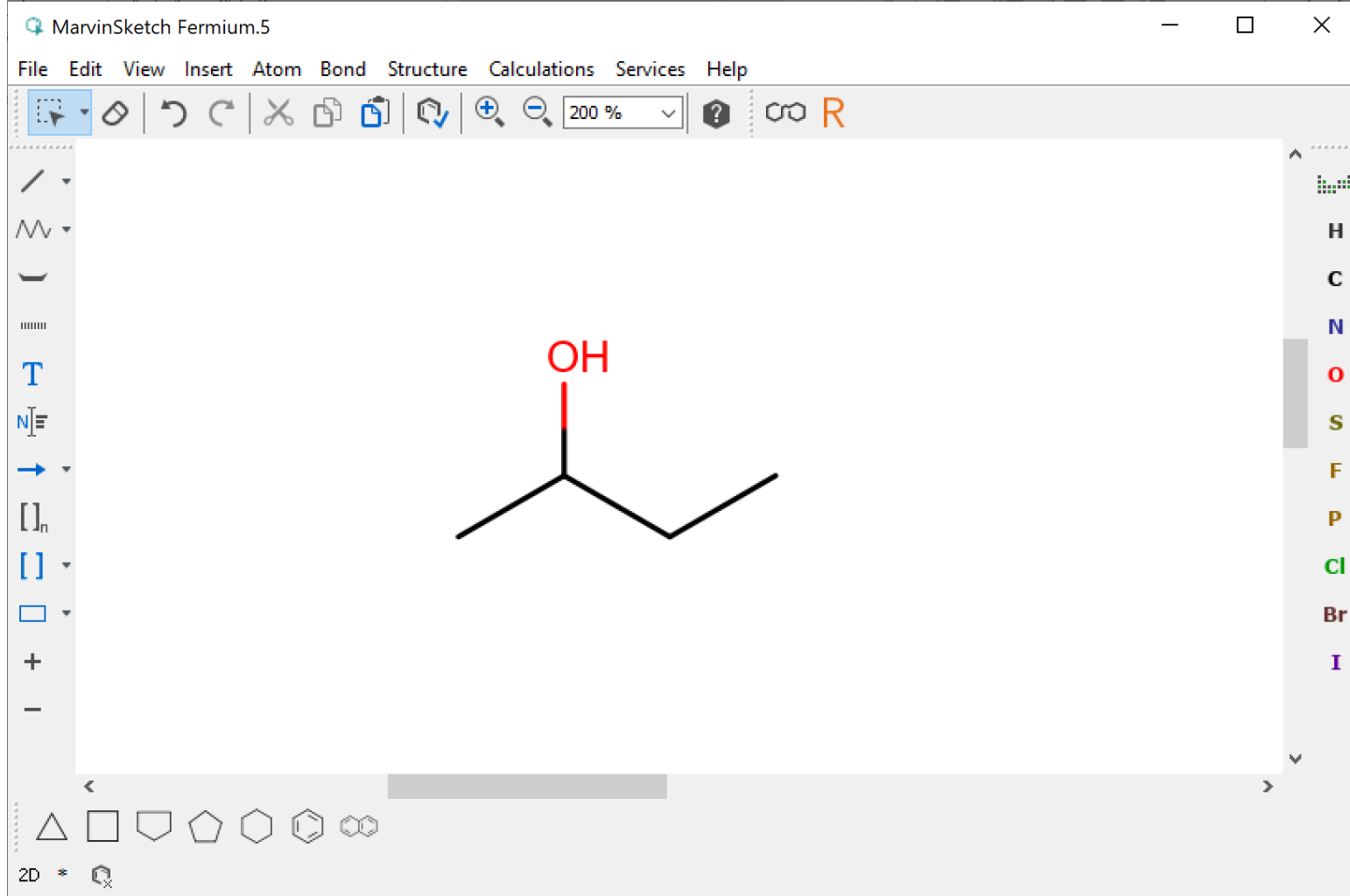
4. Polarizability –valintaruudussa valitaan Molecular-vaihtoehto (kuva4) ja valitaan ok.

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



# Mitä jää uupumaan, kun MarvinSpace -apuohjelma on poissa?





MarvinSketch – perustoiminnot, molekyylin piirtäminen

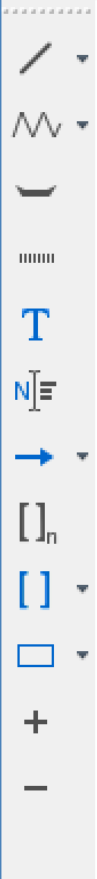
MarvinSketch 19.2

# Vaakavalikko - toiminnallisuudet

File Edit View Insert Atom Bond Structure Calculations Services Help



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



Perustyökalut

Työpöytä

Alkuaineatomit

H  
C  
N  
O  
S  
F  
P  
Cl  
Br  
I



2D

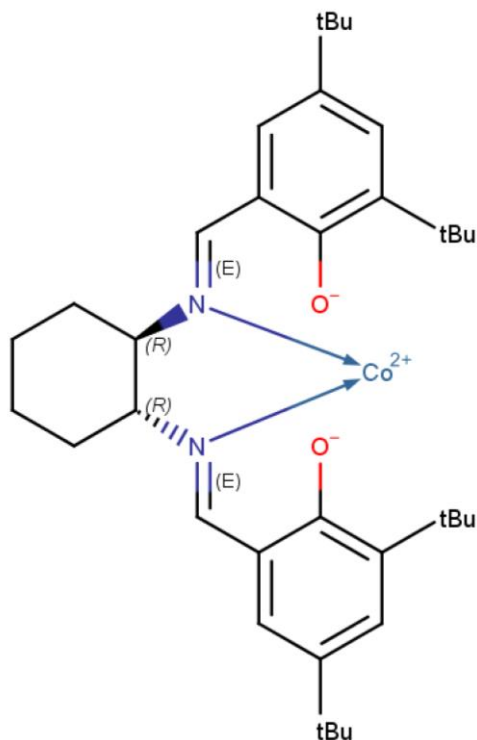
Valikkotila

Valmiita rakenteita

# Edit | Preferences - Bonds



Koordinaatiosidoksien  
merkintätapa: 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.

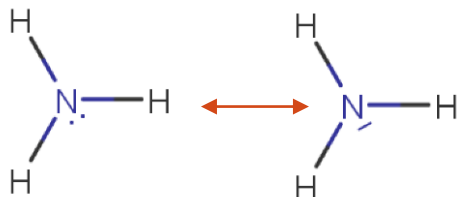
Single Atoms	Multicenter
<input checked="" type="radio"/> Arrow	<input checked="" type="radio"/> Hashed
<input type="radio"/> Solid	<input type="radio"/> Solid

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



# Edit | Preferences – Text ...



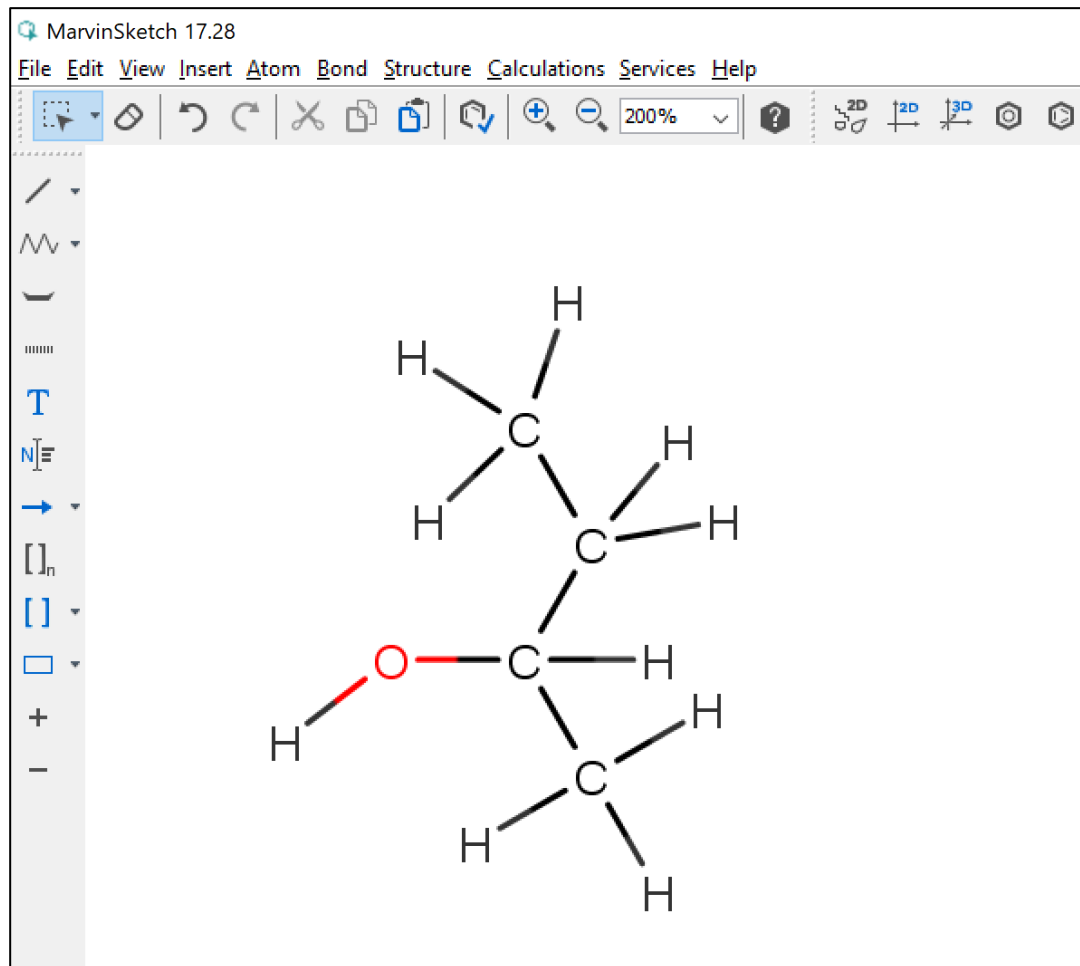
**Tekstien muotoilut** ovat mahdollisia, joskaan ei välttämättömiä. Tässä kohtaa voi määritellä sen, mihin oletusarvoisesti tekstiosiot lisätään.

A screenshot of the MarvinSketch 19.2 software interface. The main window title is "MarvinSketch 19.2" and the menu bar includes "File Edit View Insert Atom Bond Structure Calculations Services Help". The toolbar contains various icons for editing and viewing. The "Preferences" dialog box is open, with the "Text" tab selected. The "Text" tab settings include: "Font: SansSerif", "Style: Regular", "Size: 10", "Color: Choose", "Alignment: Left", and "Top". A red arrow points from the text in the left column to the "Color: Choose" button. At the bottom of the dialog are buttons for "Help Contents...", "Restore Defaults", "OK", and "Cancel".

# MarvinSketch

Pedagogisia valintoja?

## 1. Viivakaava vai täydellinen rakennekaava?

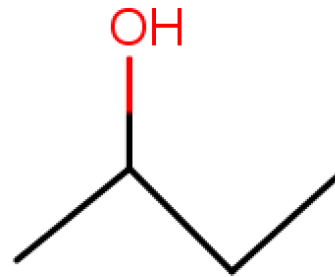




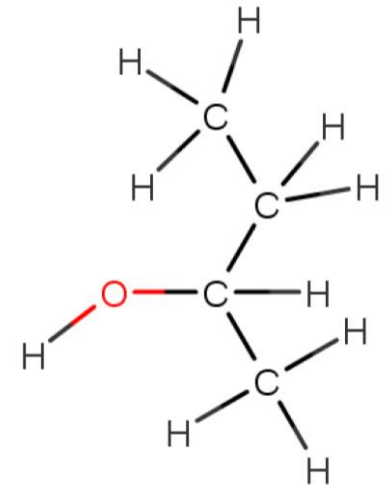
# Joko viivakaava tai täydellinen rakennekaava?

Joko viivakaava tai täydellinen rakennekaava

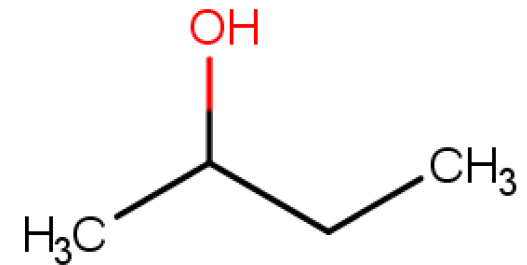
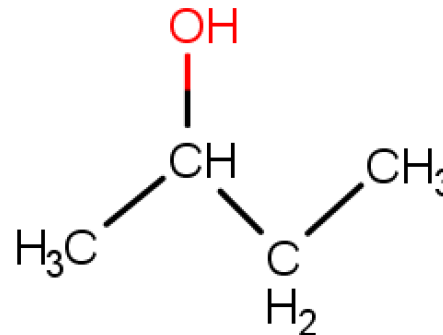
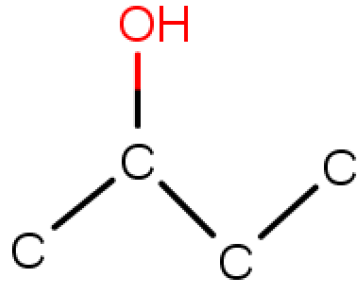
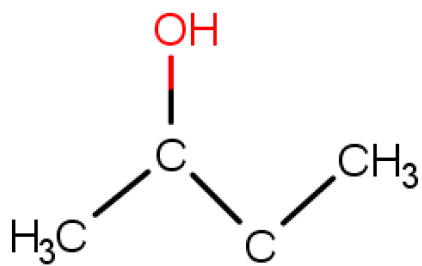
JOKO



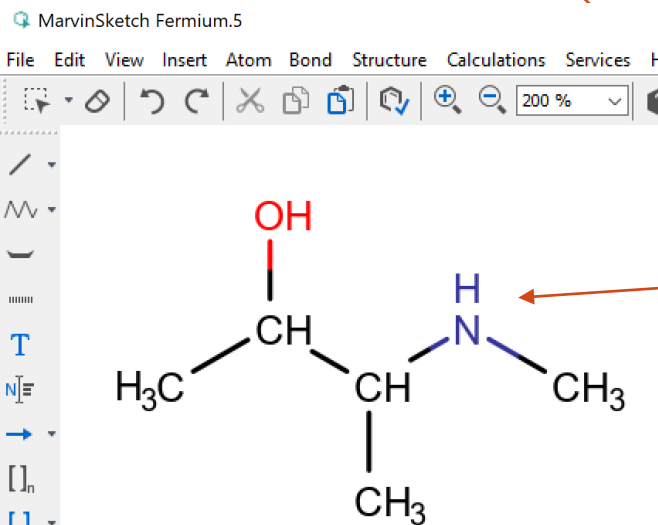
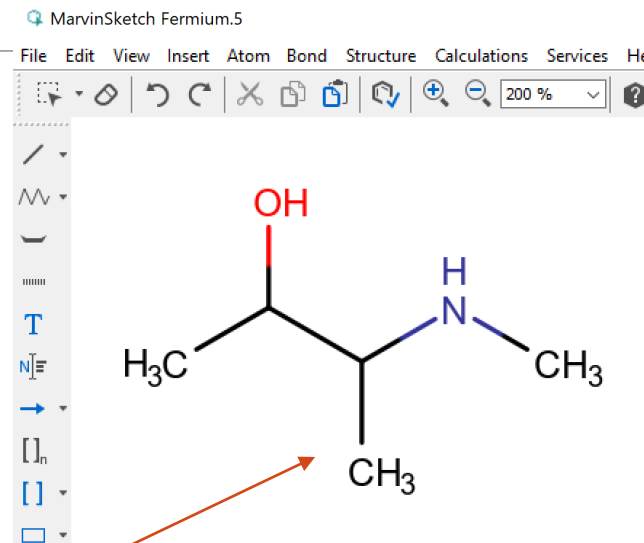
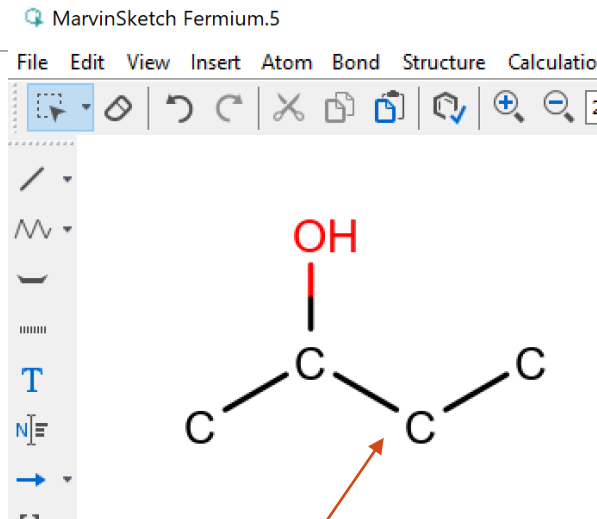
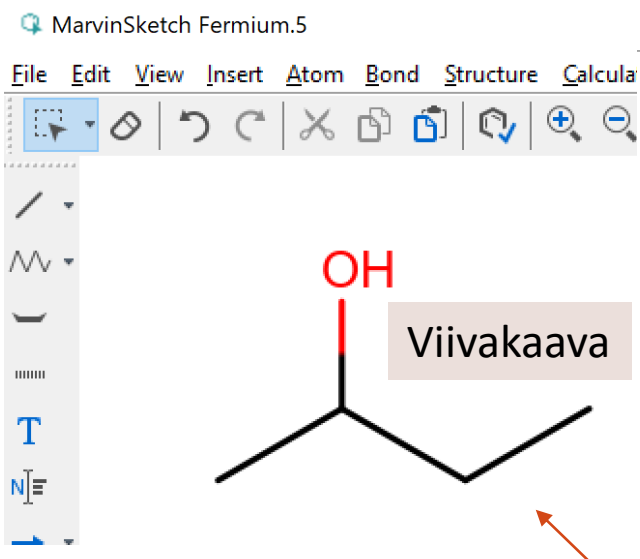
TAI



Eivät enää kelpaa yo-kokeessa



# 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>

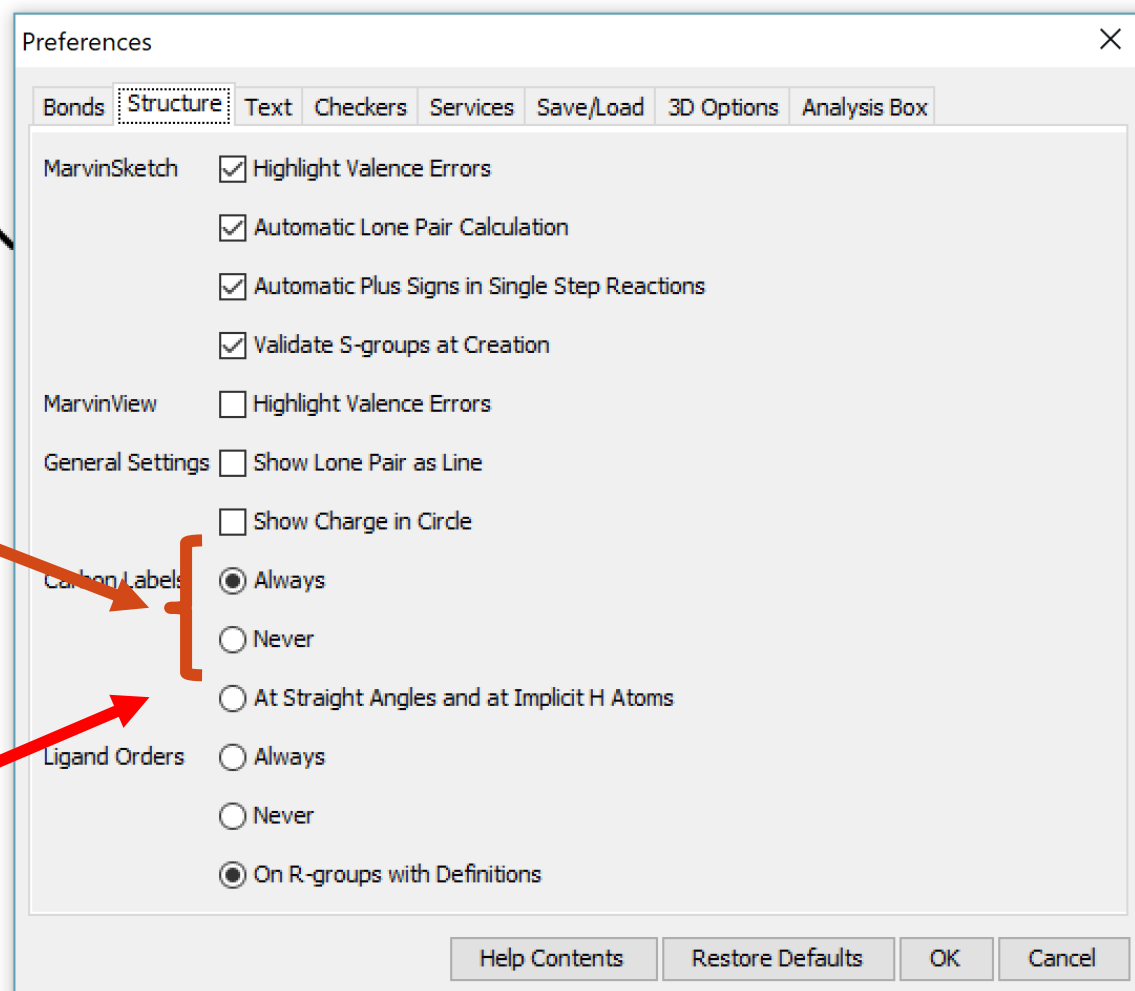
# VAIHE 1: Hiilet näkeviin tai ei?



VAIHE1: Viivakaava tai täydellinen rakennekaava

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

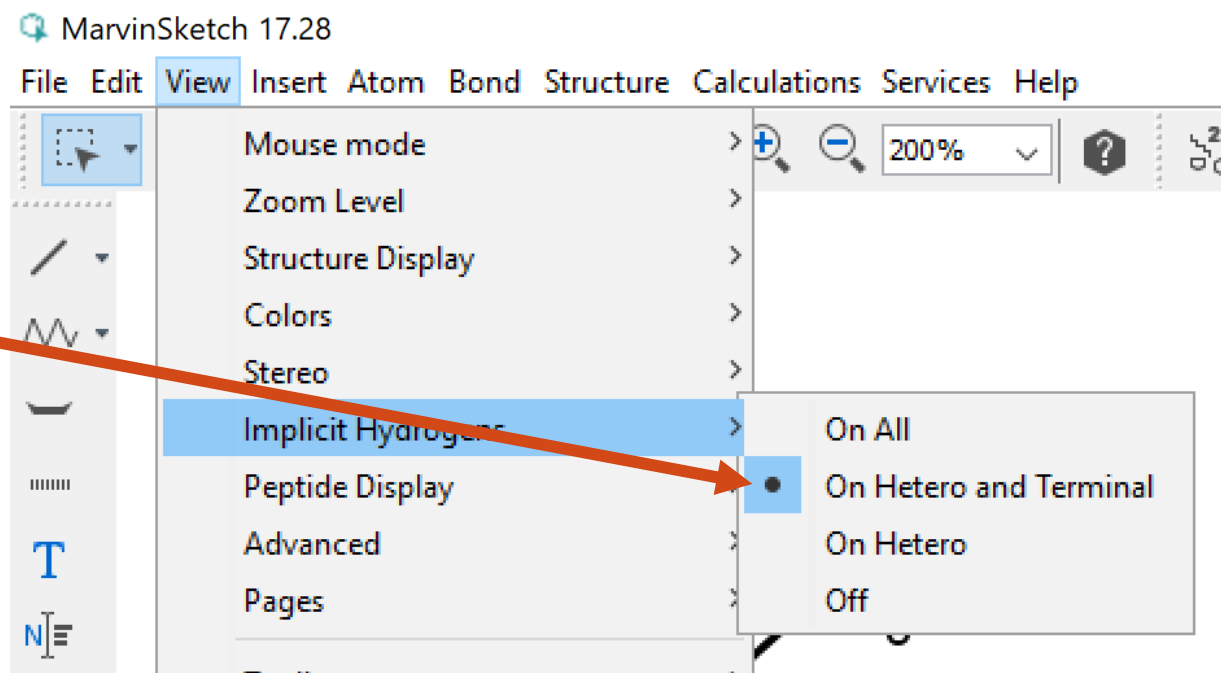
EI TÄTÄ



# VAIHE 2: "Implisiittiset vedyt" pois



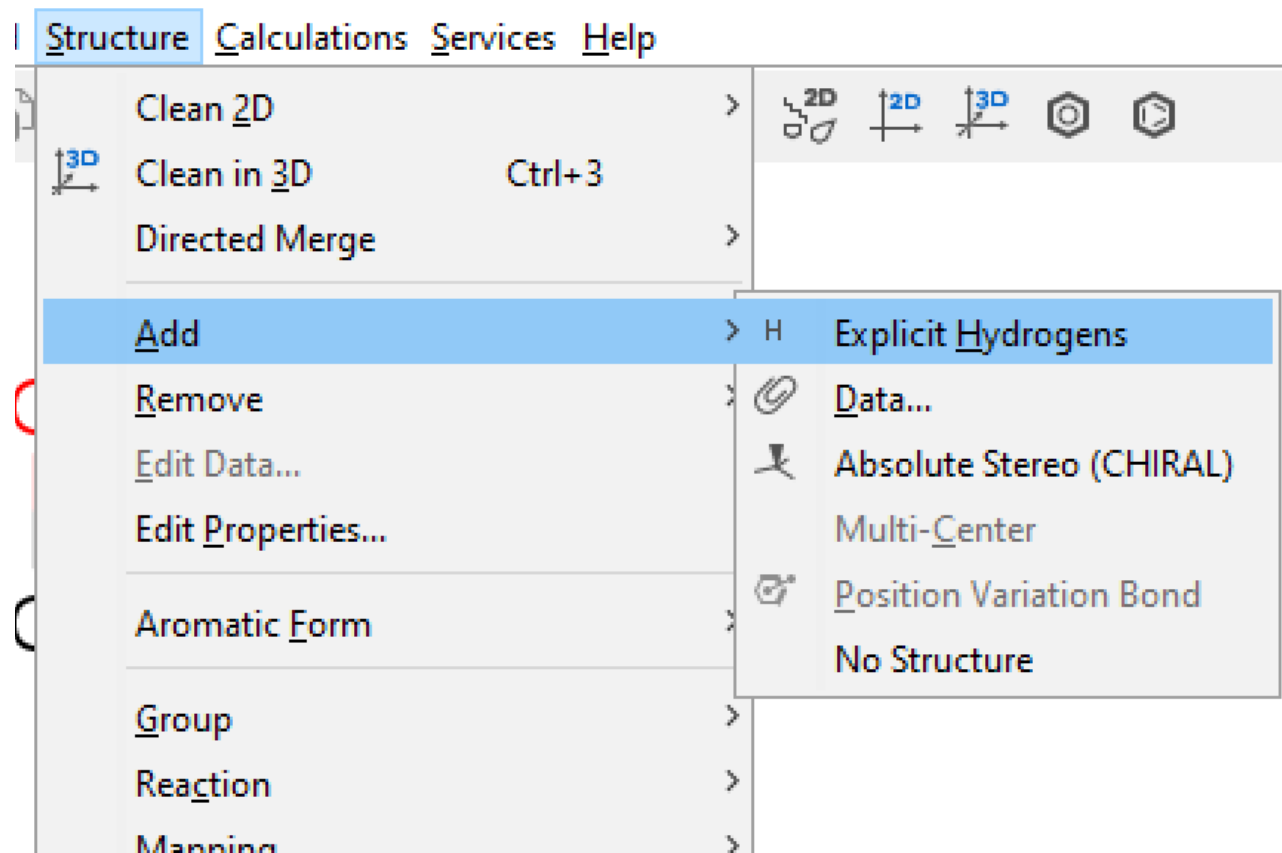
Varmistetaan vetyjen näkyminen vain "heteroatomien" yhteydessä (funktionaalinen ryhmä).



# Vaihe 3: Jos täydellinen rakennekaava →



**Täydelliseen rakennekaavaan** valitaan "Carbon labels" ALWAYS (Preferences -kohdasta). JA Structure-kohdasta **Add Explicit Hydrogens**



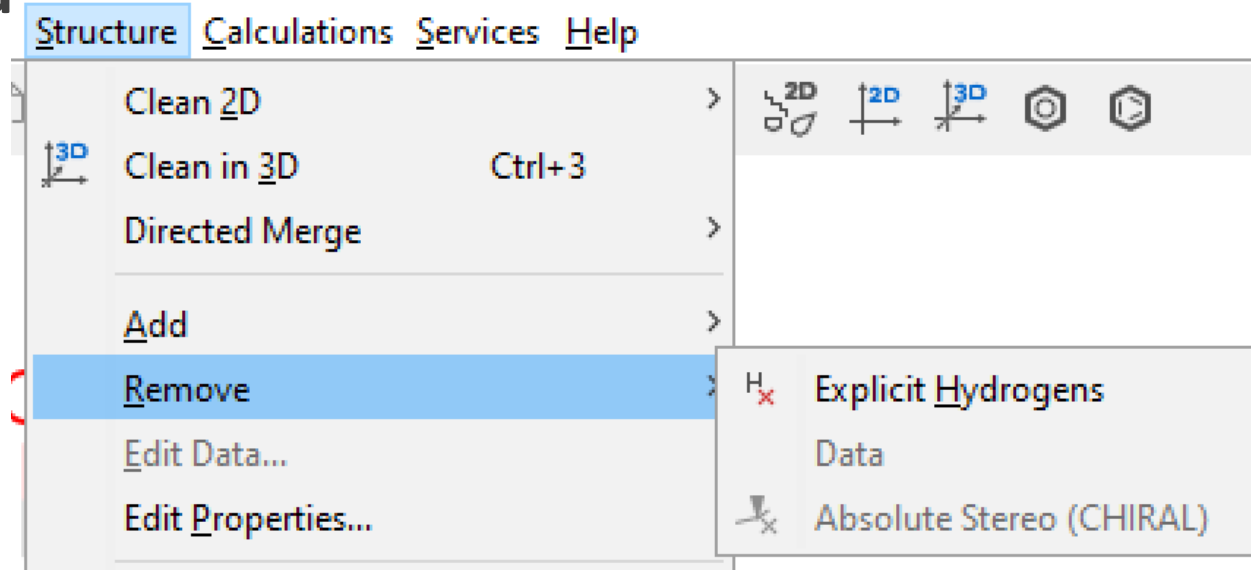


# Paluu viivakaavaan?



Jos haluaa **palata viivakaavaesitysmuotoon.**

Poistetaan vedyt (viereinen kuva) ja poistetaan hiiliatomien merkinnät (Preferences – osiosta Carbon labels → Never)



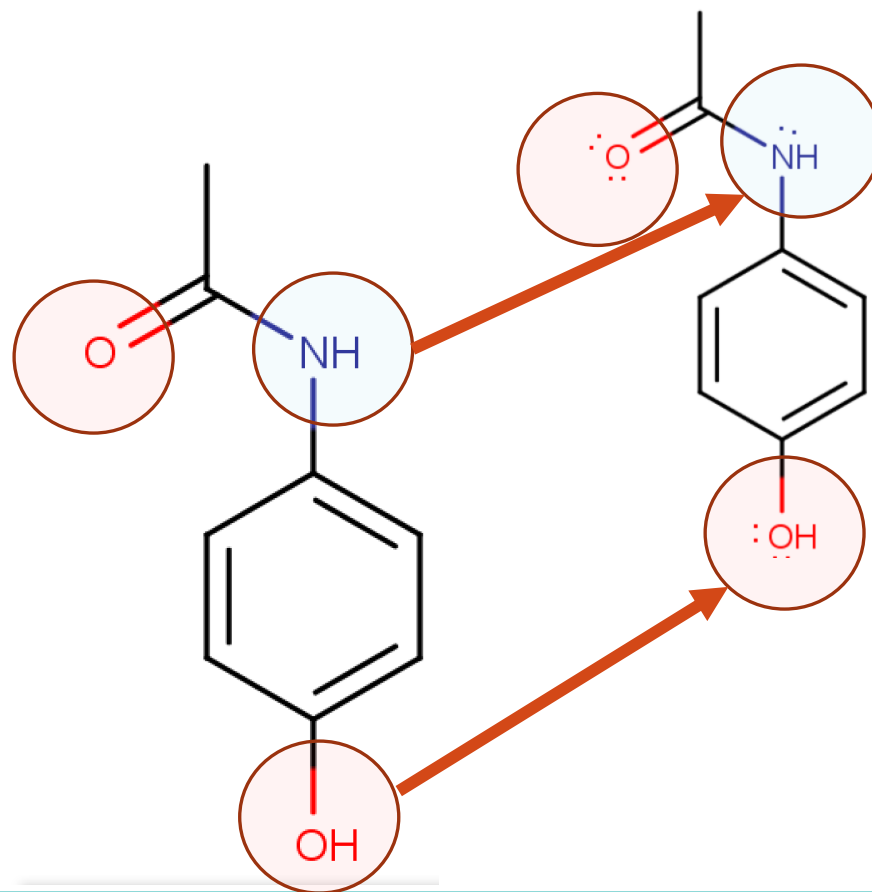
# Vapaat elektroniparit



View In **Atom** Bond Structure Calculations Services Help

- Mouse mode
- Zoom Level
- Structure Display
- Colors
- Stereo
- Implicit Hydrogens
- Peptide Display
- Advanced**
  - Atom Numbering
  - Atom Properties
  - Atom Mapping
  - Bond Lengths
  - Lone Pairs**
  - R-groups
  - R-Logic
  - Valence
  - Ligand Error
  - S-group Attachments
- Pages
- Toolbars
- Menubar F11
- Status Bar
- Grid Shift+F9
- Guidelines Ctrl+Shift+F9
- Editor style

VALITSE



Naming

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

Chemical structure of N-(4-hydroxyphenyl)acetamide (paracetamol) with lone pairs highlighted in red circles. The structure shows the acetamide group (CH<sub>3</sub>-C(=O)-NH-) attached to a para-hydroxyphenyl ring (-C<sub>6</sub>H<sub>4</sub>-OH). Lone pairs are shown on the oxygen atoms of the carbonyl and hydroxyl groups, and on the nitrogen atom of the amide group.

# 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

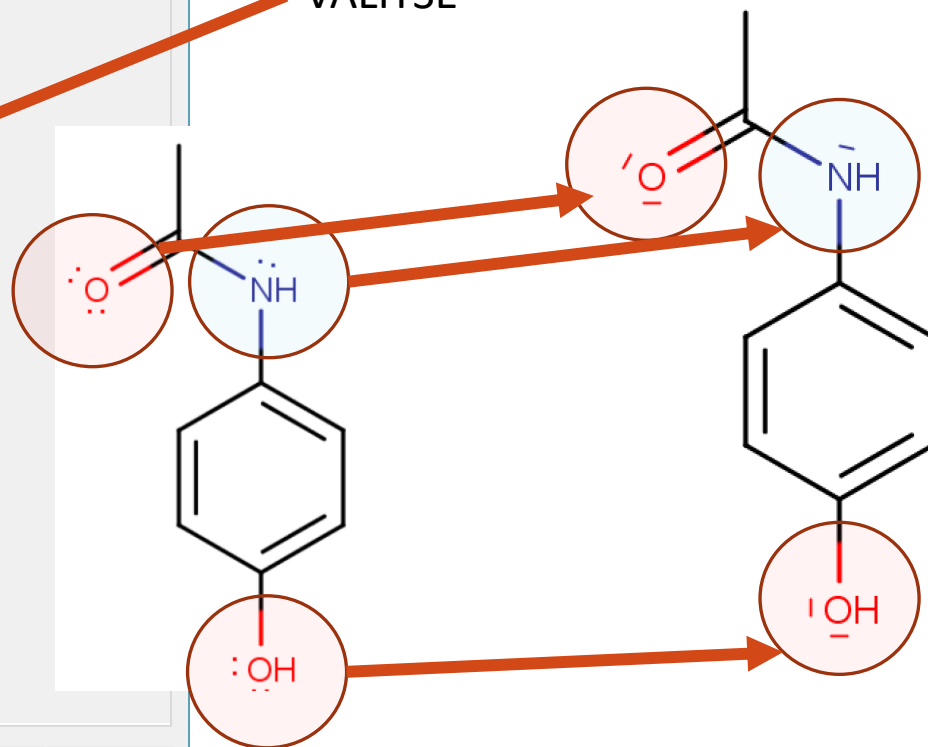
General Settings  Show Lone Pair as Line  
 Show Charge in Circle

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

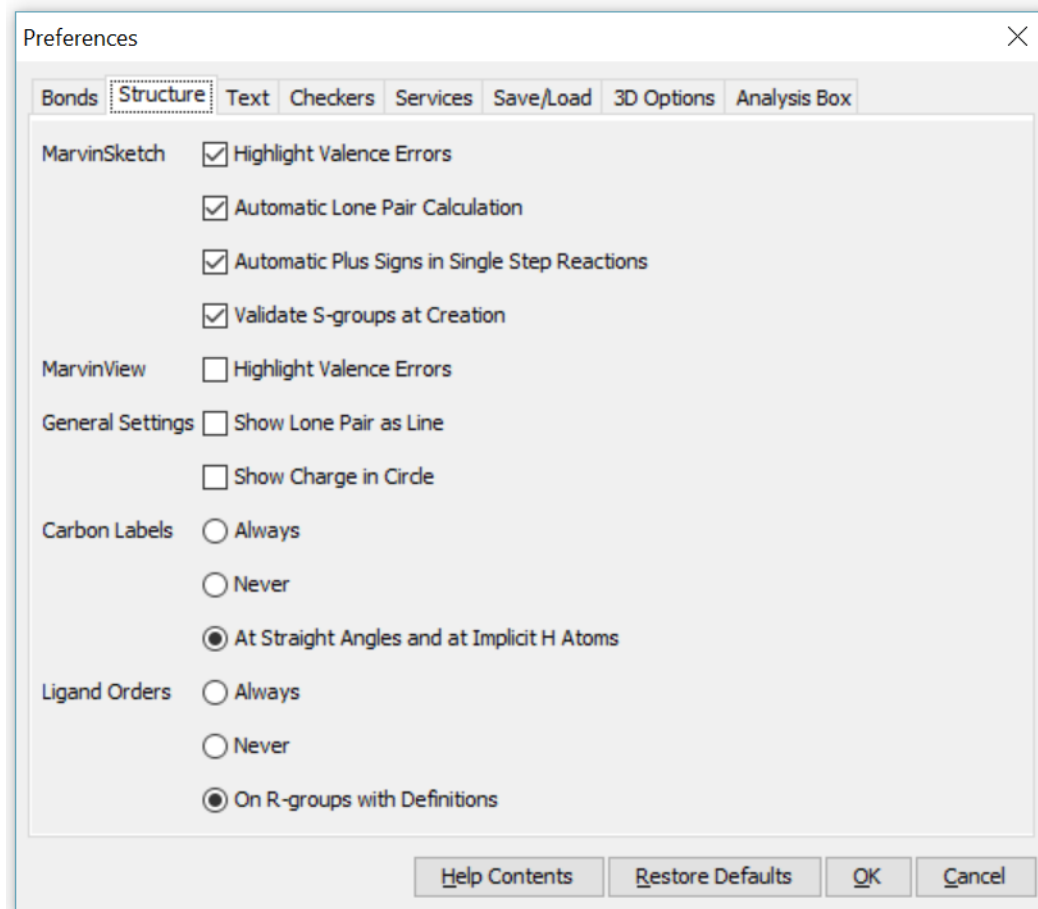
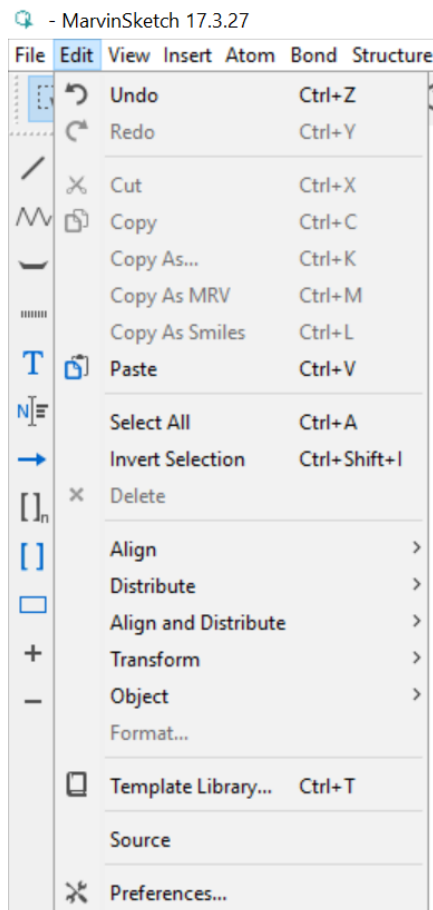
Ligand Orders  Always  
 Never  
 On R-groups with Definitions

Help Contents Restore Defaults OK Cancel

VALITSE



# Valikot – Edit – Preferences...



# Orgaanisten molekyylien piirtäminen

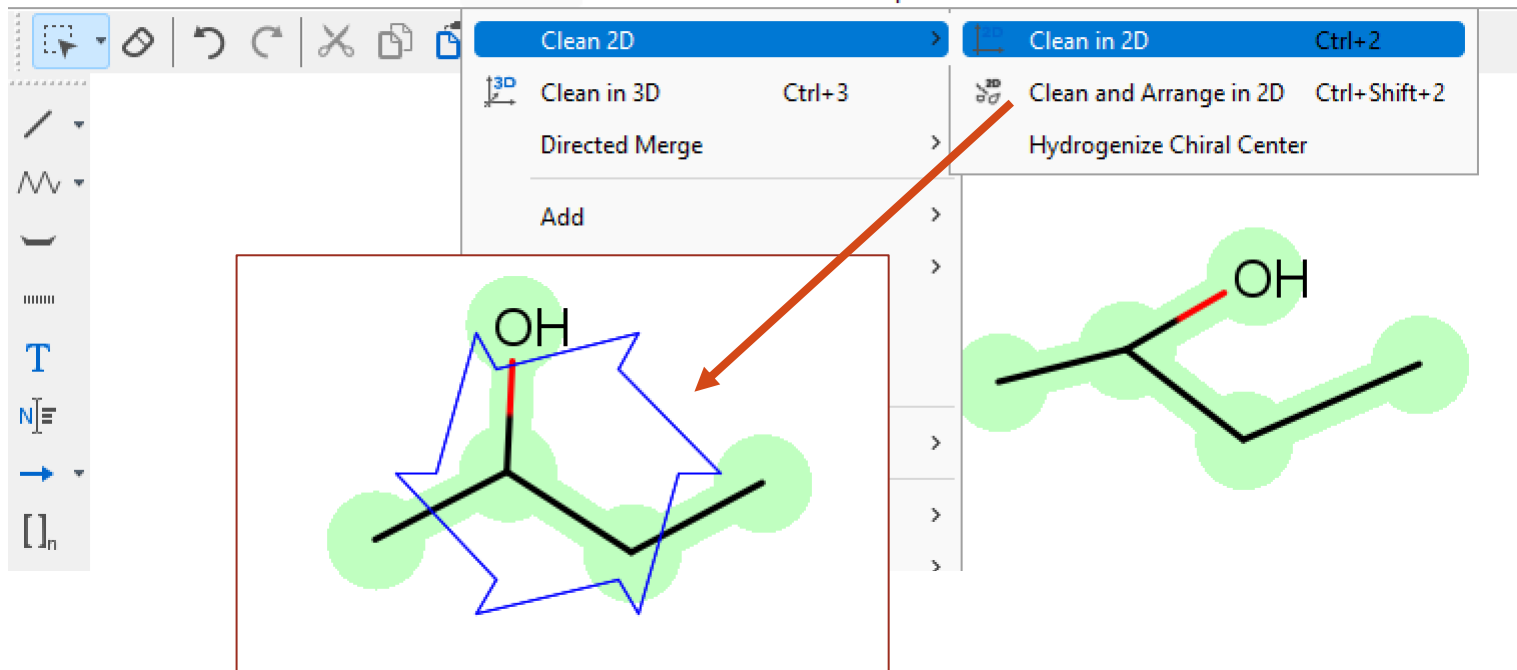
# Rakennekaavan (viivakaavan) ”puhdistaminen”



Orgaanisten molekyylien piirtäminen voi tapahtua melko vapaasti, mutta on tärkeää, että rakenteita optimoidaan ja siistitään.

MarvinSketch 22.16

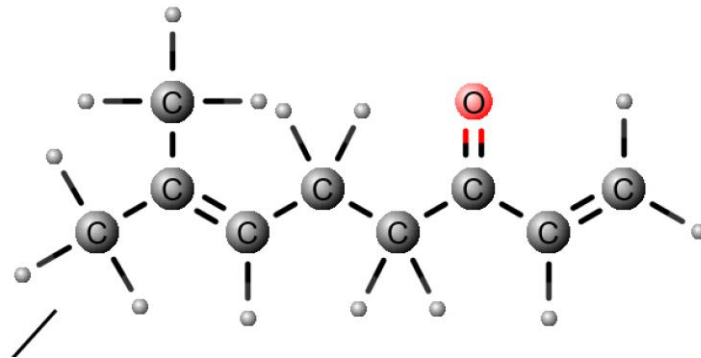
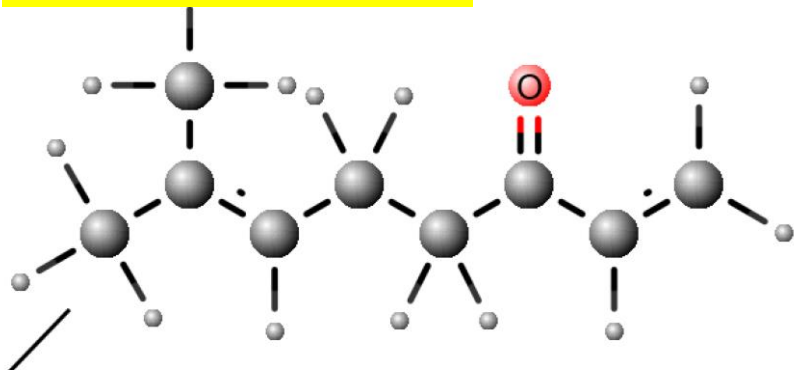
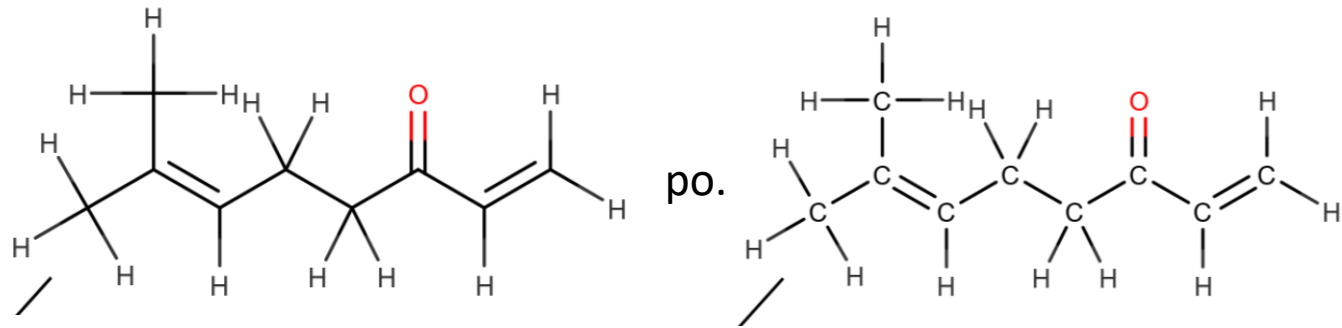
File Edit View Insert Atom Bond Structure Calculations Services Help



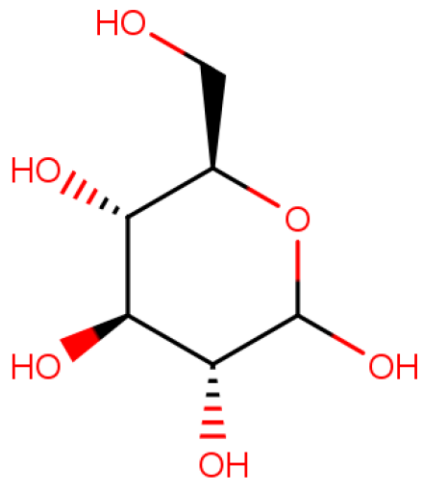
# Valitettavia esimerkkejä



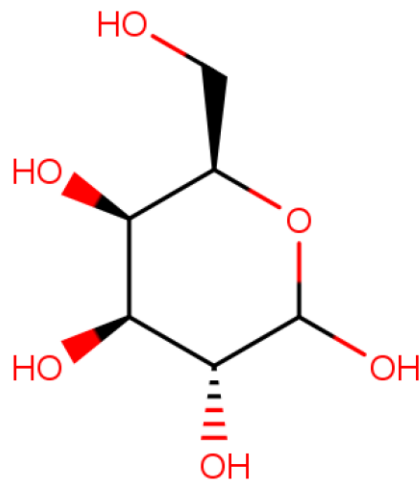
On tärkeää, että MarvinSketch – ohjelman käyttöä harjoitellaan niin, että lopputuloksena on AINA kelvollinen rakenne- tai viivakaava.



# Erilaiset sidokset, 3D-mallintaminen



glukoosi



galaktoosi



Tuolikonformeeeri



Venekonformeeeri

Sidostyytit?

3D-mallintamista  
2D-pöydällä

Tummennokset

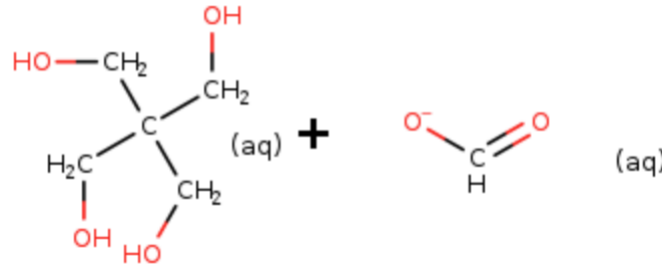
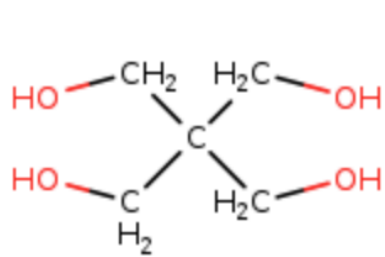
Pulmia?

MarvinSketch Fermium.5

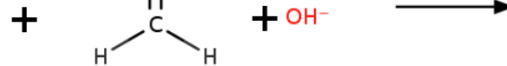
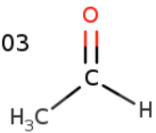
File Edit View Insert Atom Bond Stru



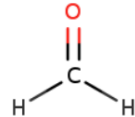
# Varottavia esimerkkejä – syksy 2022



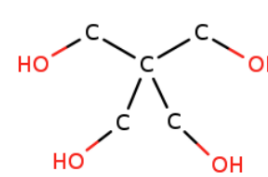
Name: formaldehyde  
Molecular weight: 30,03  
Formula: CH<sub>2</sub>O



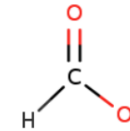
Name: formaldehyde  
Molecular weight: 30,03  
Formula: CH<sub>2</sub>O



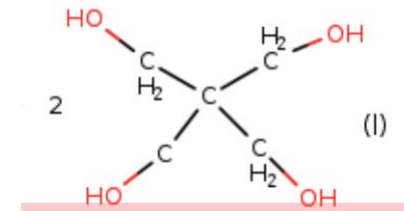
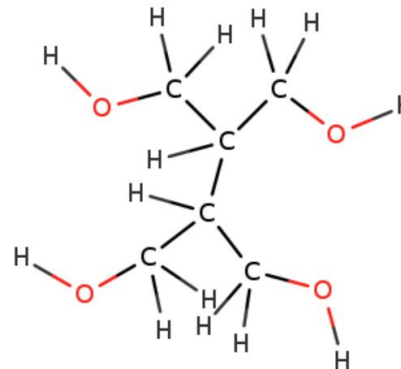
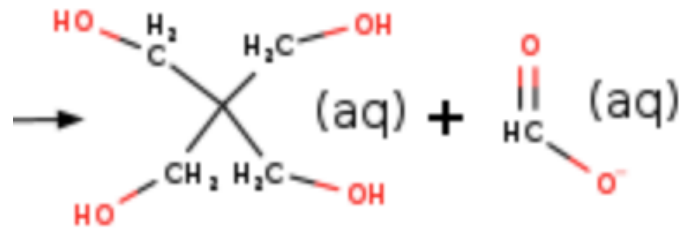
Name: water  
Molecular weight: 18,02  
Formula: H<sub>2</sub>O



Name: 2,2-bis(hydroxymethyl)propane-1,3-diol  
Molecular weight: 136,15  
Formula: C<sub>5</sub>H<sub>12</sub>O<sub>4</sub>



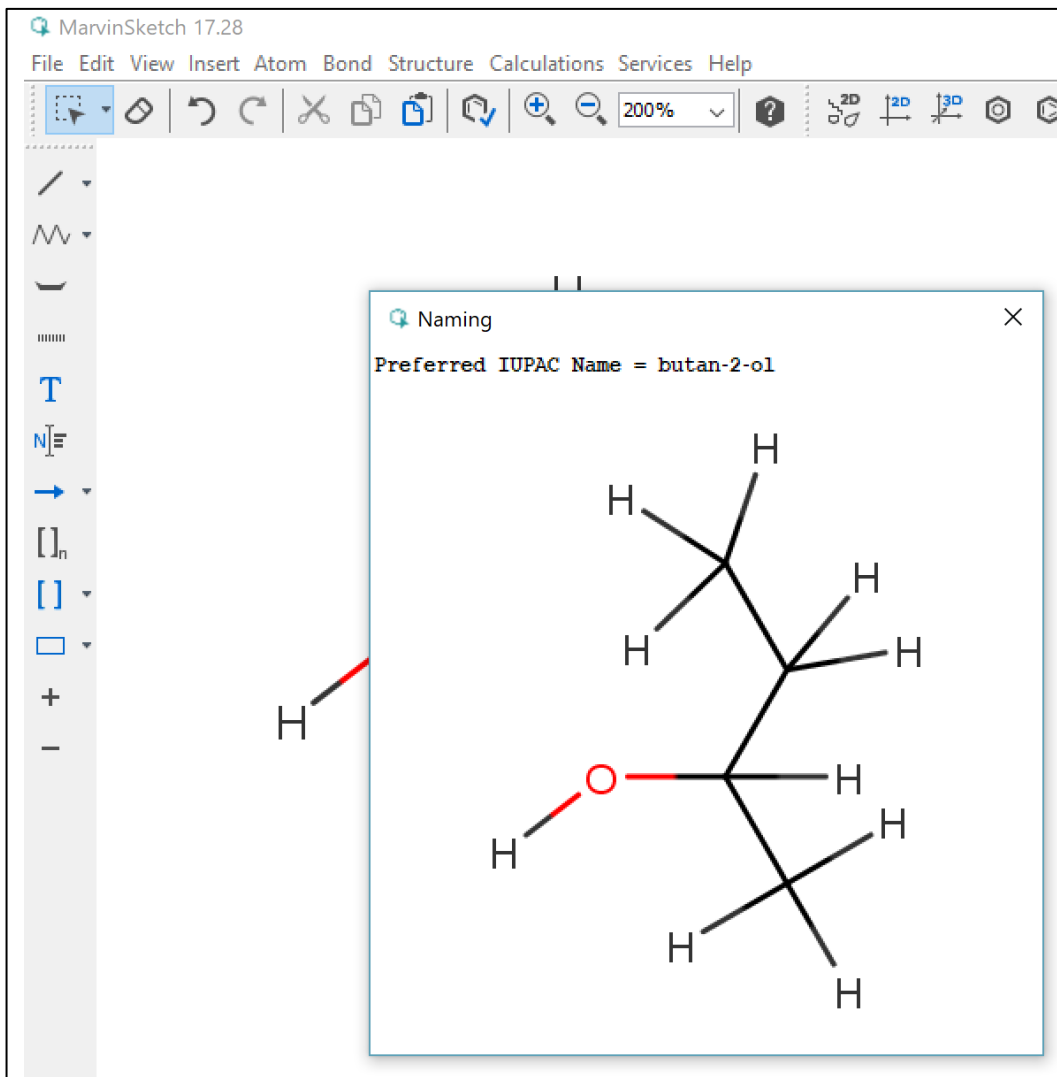
Name: formic acid  
Molecular weight: 46,03  
Formula: CH<sub>2</sub>O<sub>2</sub>



# MarvinSketch

Pedagogisia valintoja?

## 2. Nimeämisen opetus

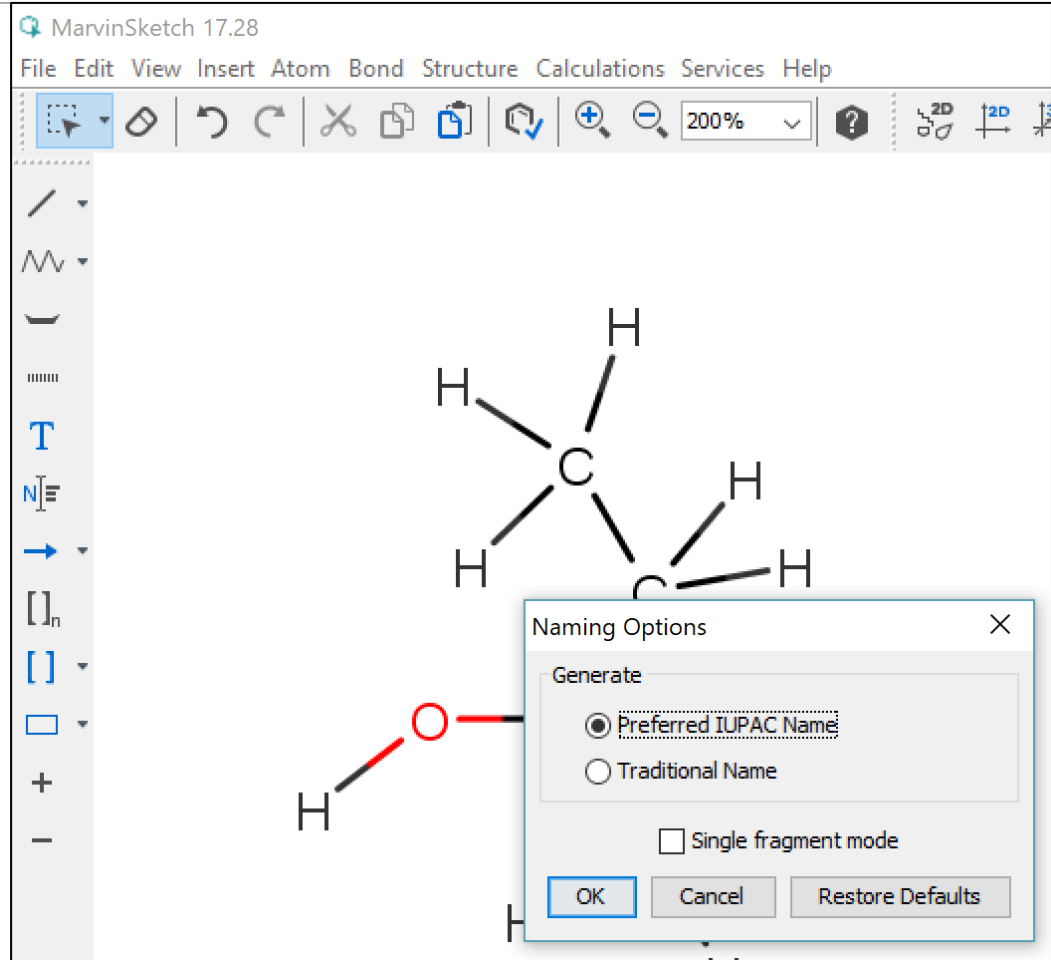


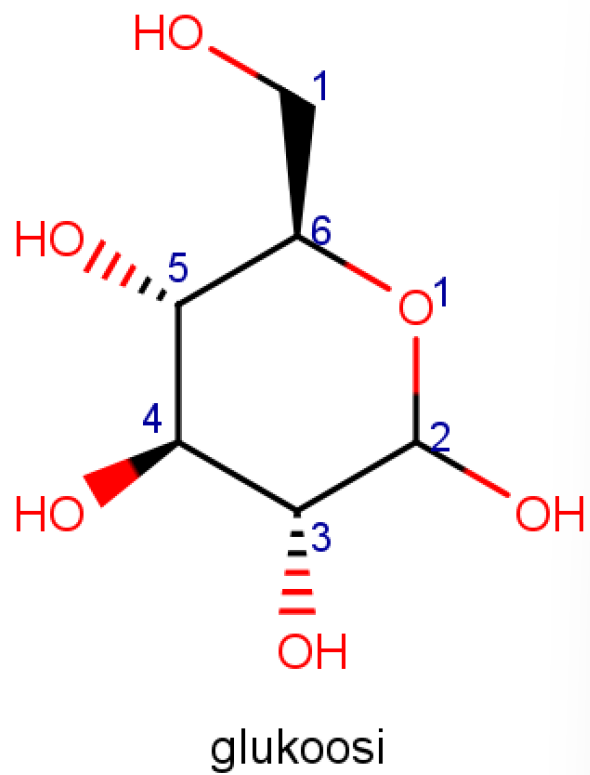
# MarvinSketch nimeää molekyyliä (myös Abitti-versiossa)



Miten kurssilla opetetaan orgaanisten molekyylien nimeäminen? Miksi?

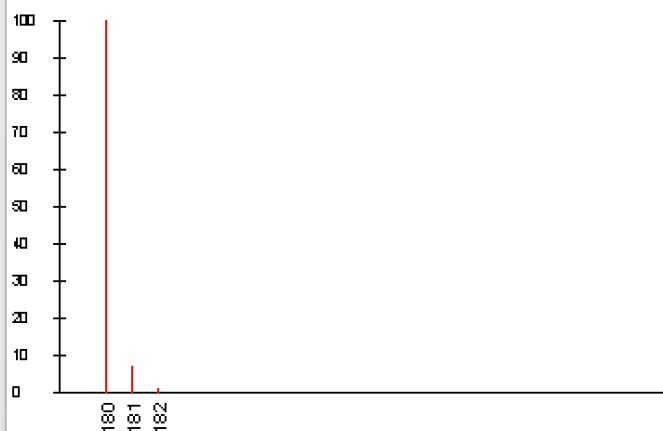
MarvinSketch tuottaa nimet ja toisinpäin – nimestä rakenteen.





## Elemental Analysis

Molecular weight: 180,156  
 Exact molecular weight: 180,063388106  
 Nominal mass: 180  
 Isotope formula:  $C_6H_{12}O_6$   
 Isotope formula with charge:  $C_6H_{12}O_6$   
 Dot-disconnected isotope formula:  $C_6H_{12}O_6$   
 Dot-disconnected isotope formula with charge:  $C_6H_{12}O_6$   
 Isotope composition: C (40.00%), H (6.71%), O (53.28%)  
 Atom count: 24  
 Mass spectrum [m/z: relative abundance]:  
 180: 1.00 181: 0.07 182: 0.01



## Elemental Analysis Options

## Type

- Molecular weight
- Exact molecular weight
- Nominal mass
- Formula
- Formula with charge
- Dot-disconnected formula
- Dot-disconnected formula with charge
- Mass spectrum
- Composition
- Atom count

- Recognize formula in pseudo labels
- Use D / T symbols for Deuterium / Tritium

Single fragment mode

OK

Cancel

Restore Defaults

# Aputoimintoja

# Elemental Analysis: Moolimassan määrittäminen



Marvinin avulla voidaan määrittää monia asioita:

Esm. **molekyylin moolimassa** Elemental Analysis –valinnalla

Kohdassa myös:

- molekyylikaava
- alkuainekoostumus (%)
- massaspektri (viimeiset piikit)

MarvinSketch 22.16

File Edit View Insert Atom Bond Structure Calculations Services Help

Elemental Analysis Options

Type

- Molecular weight
- Exact molecular weight
- Nominal mass
- Formula
- Formula with charge
- Dot-disconnected formula
- Dot-disconnected formula with charge
- 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

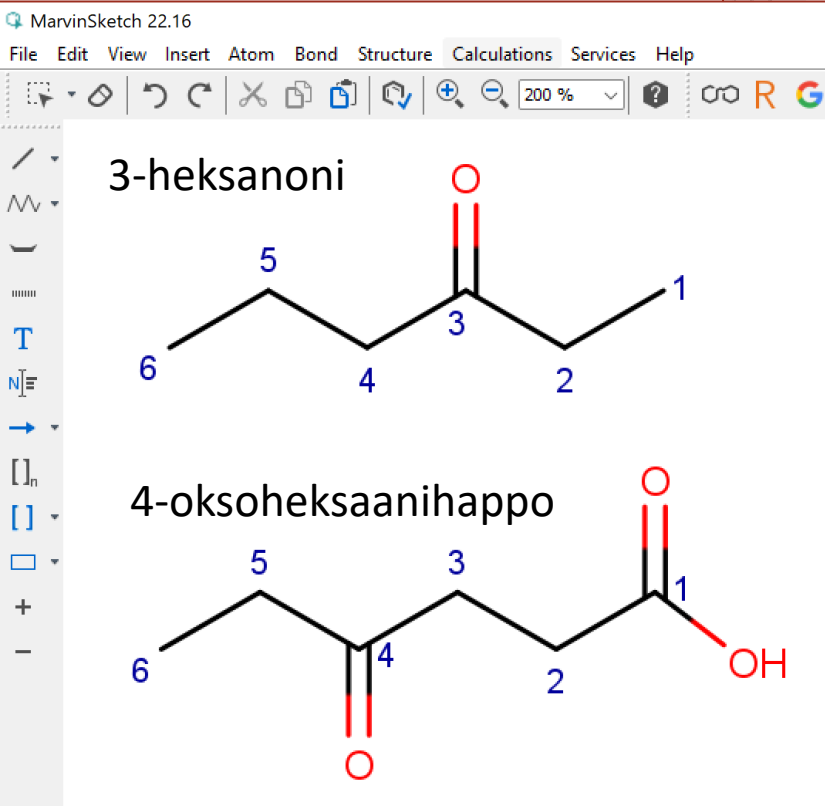
Molecular weight: 336,479  
Exact molecular weight: 336,220163530  
Nominal mass: 336  
Isotope formula:  $C_{22}H_{28}N_2O$   
Isotope formula with charge:  $C_{22}H_{28}N_2O$   
Dot-disconnected isotope formula:  $C_{22}H_{28}N_2O$   
Dot-disconnected isotope formula with charge:  $C_{22}H_{28}N_2O$   
Isotope composition: C (78.53%), H (8.39%), N (8.33%), O (4.75%)  
Atom count: 53  
Mass spectrum [m/z: relative abundance]:  
336: 1.00 337: 0.25 338: 0.03

336 337 338

# Hiiliatomien numerointi



Hiiliketjun hiilien numerointi nimeämistä ajatellen



MarvinSketch 19.2

File Edit View Insert Atom Bond Structure Calculations Services Help

View menu options:

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

# Konformeerit (Yo-koe s2022)



Konformaatioita  
voi yrittää  
analysoida  
Marvinilla (antaa  
arvion  
energioista)

MarvinSketch 22.16

File Edit View Insert Atom Bond Structure Calculations Services Help

Conformers

Conf: 1 Energy: 39.97 kcal/mol	Conf: 2 Energy: 40.2 kcal/mol
lactose	lactose
Conf: 3 Energy: 40.53 kcal/mol	Conf: 4 Energy: 40.57 kcal/mol
lactose	lactose

Select

Conformers Options

- Force Field: Dreiding
- Energy unit: kcal/mol
- Optimization limit: Normal
- Return only the lowest energy conformer found
- Maximum number of conformers: 10
- Diversity limit: 0.1
- Timelimit (s): 900
- Prehydrogenize
- Hyperfine
- Multi-fragment optimization
- Visualize H bonds

OK Cancel Restore Defaults

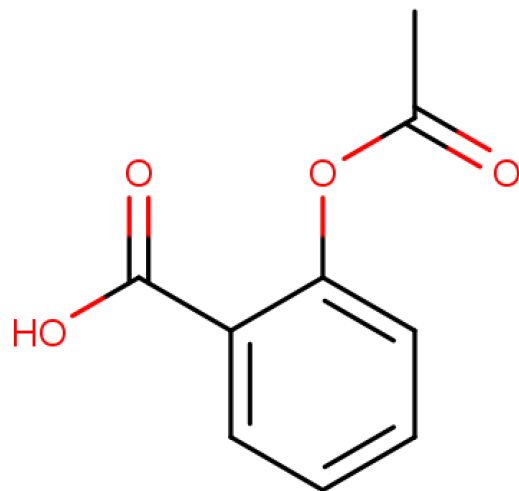
# Molekyylin 3D-kuvan avaaminen, avaruusgeometriaa



MarvinSketch 21.20

File Edit View Insert Atom Bond Structure Calculations Services Help

200 %



Polarizability Options

Decimal places

Type

Molecular

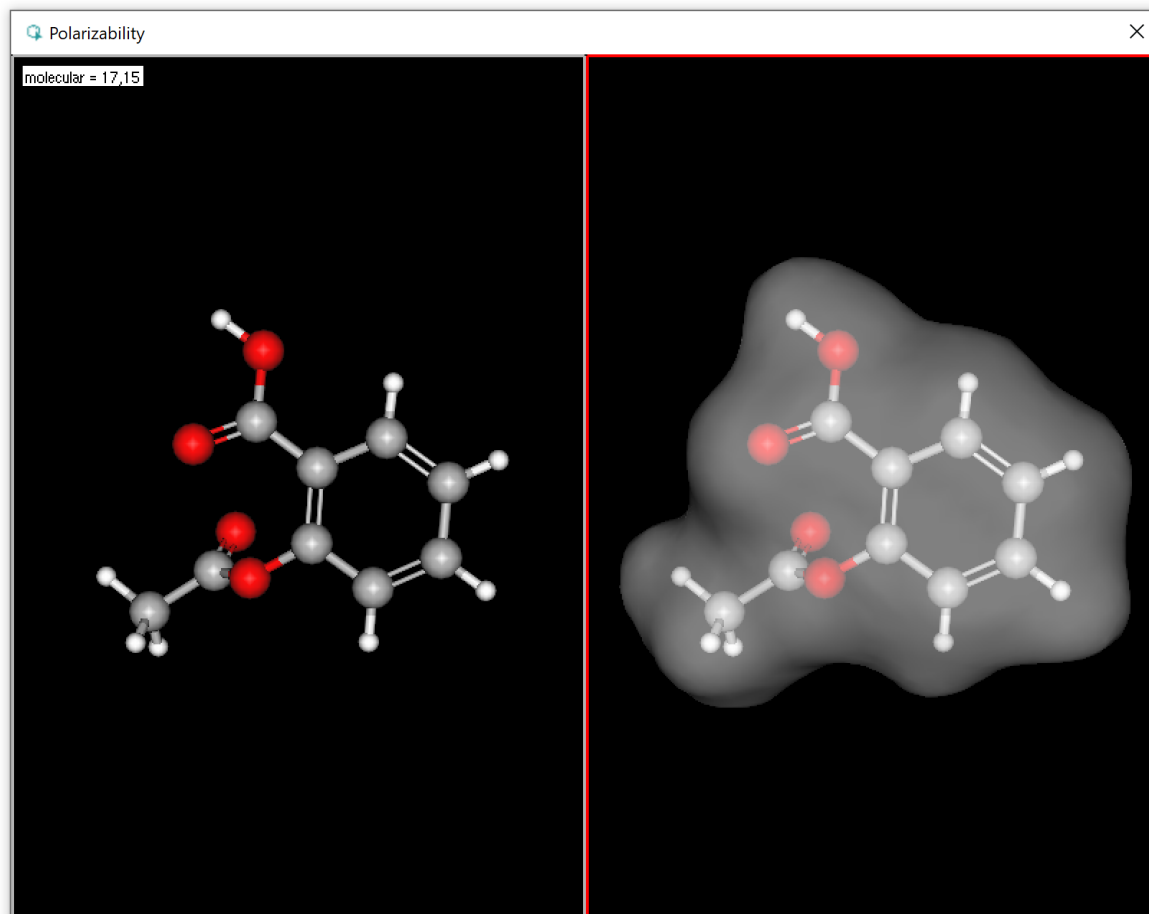
Atomic

Take 3D geometry (Thole)

Take major microspecies

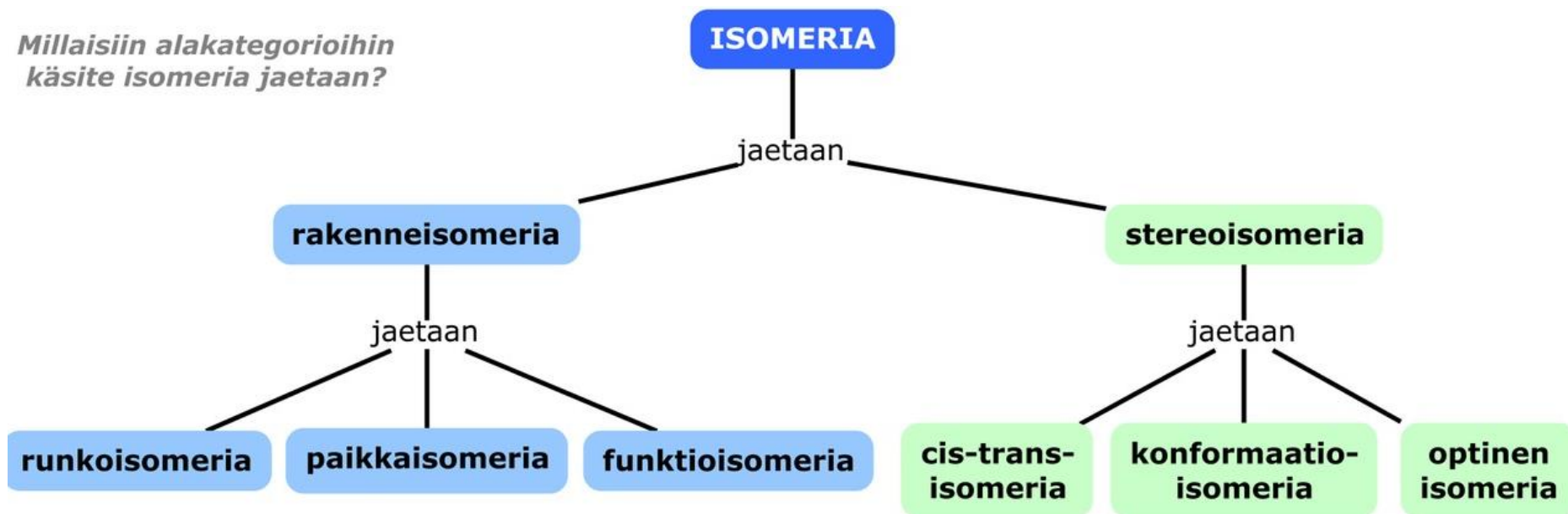
at pH

Display in MarvinSpace





*Millaisiin alakategorioihin  
käsite isomeria jaetaan?*



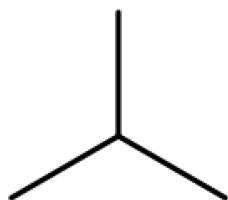
# MarvinSketch ja isomeria

# Isomerian opetus



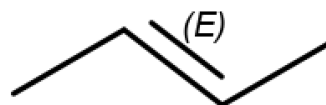
**Hiilivedyt** - funktionaaliset ryhmät: kaksoissidos, kolmoissidos, bentseenirengas

ALKAANIT



runkoisomeerejä

ALKEENIT



trans eli E

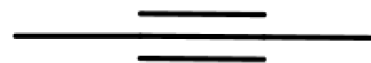


cis eli Z (Z)

cis-trans-isomeria

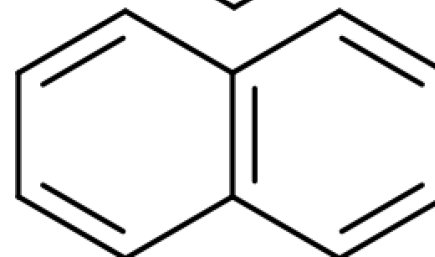
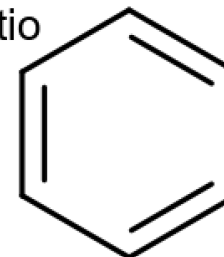
E/Z-isomeria

ALKYNYNI



sp-hybridisaatio

sp<sup>2</sup>-hybridisaatio



konformaatioisomeria (stereoisomeriaa):

sp<sup>3</sup>-hybridisoituneiden C-atomien sigma-sidos (sp<sup>3</sup>-sp<sup>3</sup>)

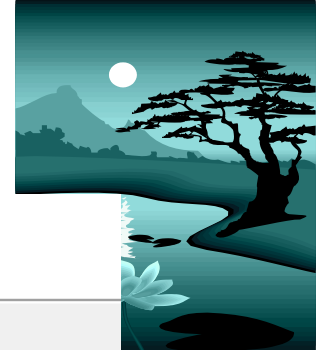
# Stereoisomerian opetus ja MarvinSketch (Abittiversio)



- cis-trans-isomeria
  - MarvinSketch ei tunne cis-trans-isomeriaa, vaan **E/Z-isomerian**
  - trans  $\rightarrow$  E = entgegen ja cis  $\rightarrow$  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

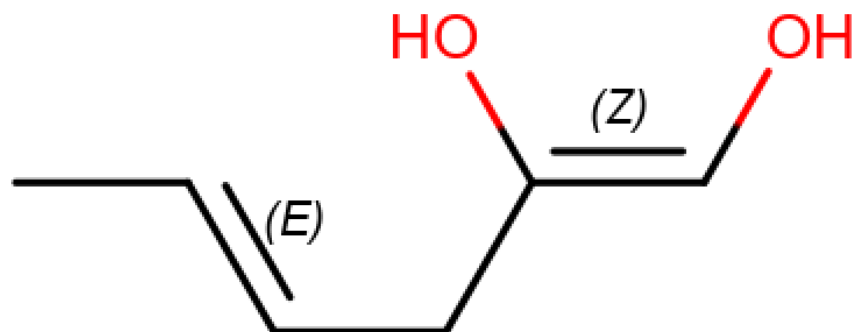
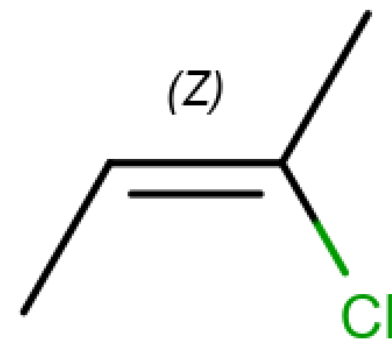
File Edit View Insert Atom Bond Structure Calculations Services Help

View menu options:

- Mouse Mode
- Zoom Level
- Structure Display
- Colors
- Stereo**
- 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 icon
- Refresh icon
- Label: 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 'E/Z Labels' checked. Other options in the 'Stereo' sub-menu include 'R/S Labels', 'M/P Labels', and 'Absolute Labels'. The main menu also shows options like 'Transform', 'Zoom', 'Display', 'Colors', 'Implicit Hydrogens', 'Peptide Display', 'Misc', 'Pages', 'Periodic System...', 'Open MarvinView2D', 'Open MarvinView3D', 'Toolbars', 'Menubar', 'Status Bar', 'Grid', 'Guidelines', 'Configurations', and 'Customize...'. The zoom level is set to 200%.

2-Buteeni.mrv - MarvinSketch 19.2

File Edit View Insert Atom Bond Structure Calculations Services Help

The screenshot shows the toolbar of MarvinSketch 19.2. The 'Stereo' icon is highlighted. Below the toolbar, a chemical structure of 2-buten-1-ol is shown, labeled '(Z)'. The structure is a skeletal formula of a trans-2-butene derivative with a hydroxyl group on the terminal carbon.

(Z)

(E)

(Z)

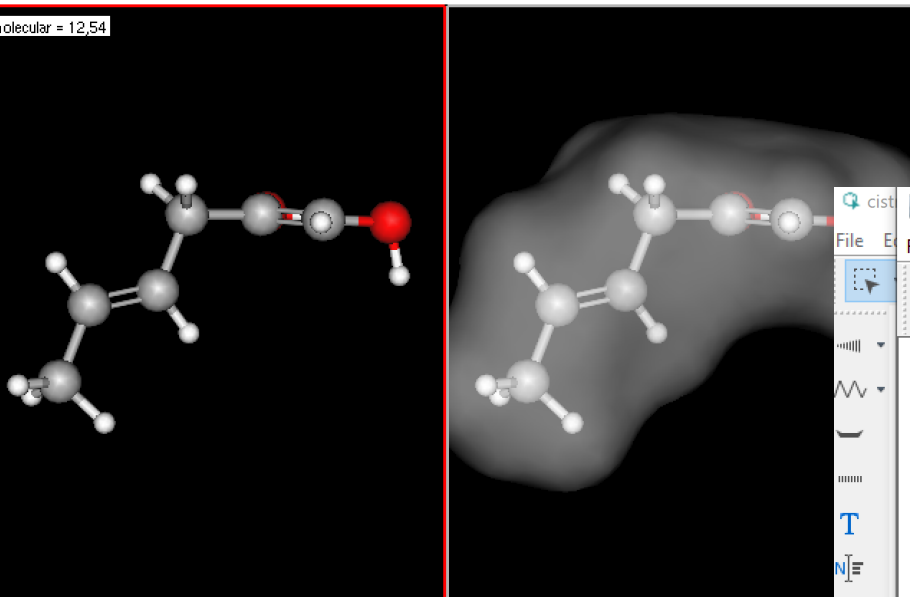
# cis-trans- /E/Z-isomeria ja 3D



cistrans\_isomeriaa.mrv - MarvinSketch Fermium.5

Polarizability

molecular = 12,54



Polarizability Options

Decimal places 2

Type

- Molecular
- Atomic

Fermium-versiolla tehty 3D

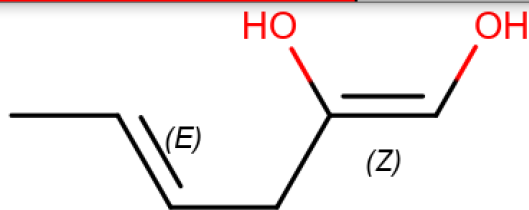
MarvinSpace

File Edit Display Show Animation Layout Alignment Help

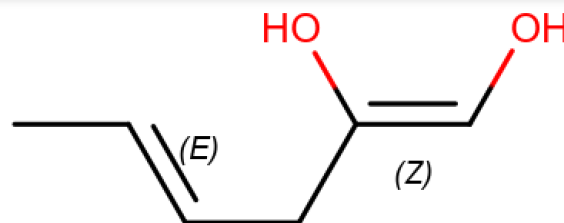
1A 60° -15°

Depth... Clippi... Isosurface 0,025

Ligand



Abitti-versiolla ja uudemmallalla tehty 3D



# Peilikuvaisomeriaa ja piirtäminen



MarvinSketch Fermium.5

File Edit View Insert Atom Bond Structure Calculations Services Help

Mouse Mode > 200 % ?

Zoom Level >

Structure Display >

Colors >

Stereo >

- R/S Labels >  All Possible
- E/Z Labels
- M/P Labels
- Absolute Labels
- All
- Absolute Stereo
- None

Implicit Hydrogens >

Peptide Display >

Advanced >

Pages >

Toolbars >

Menubar F11

Status Bar

Grid Shift+F9

Guidelines Ctrl+Shift+F9

Editor Style >

HO (?) NH<sub>2</sub>

- Double
- Triple
- Aromatic
- Single Up
- Single Down
- Single Up or Down
- Double Cis or Trans

HO (R) NH<sub>2</sub>

HO (S) NH<sub>2</sub>

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

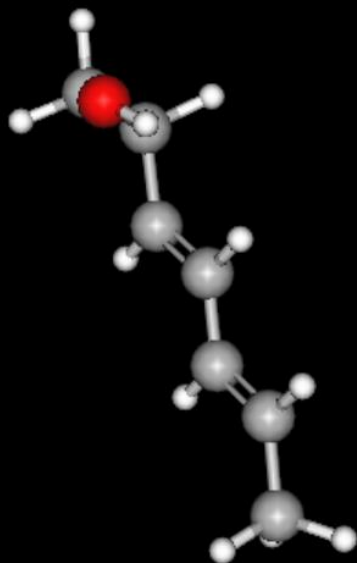
3 4

Select

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



molecular = 13,77



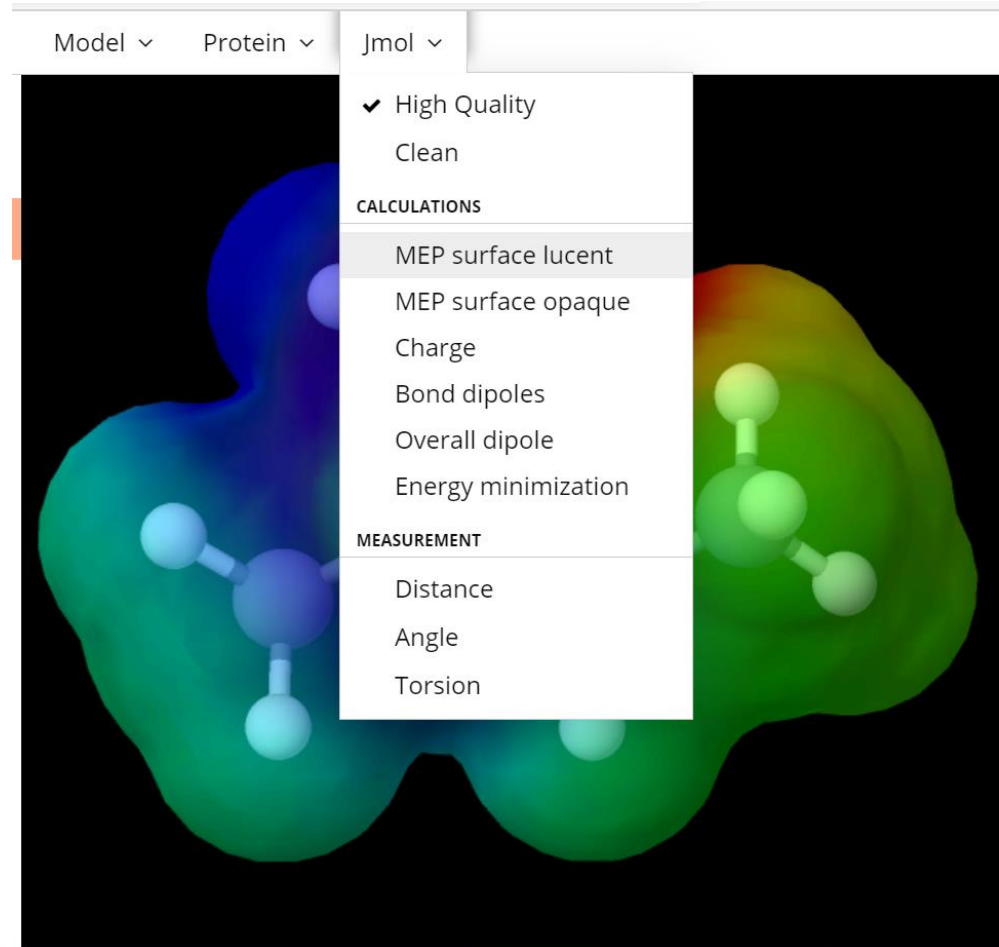
MarvinSpace – 3D

# 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.

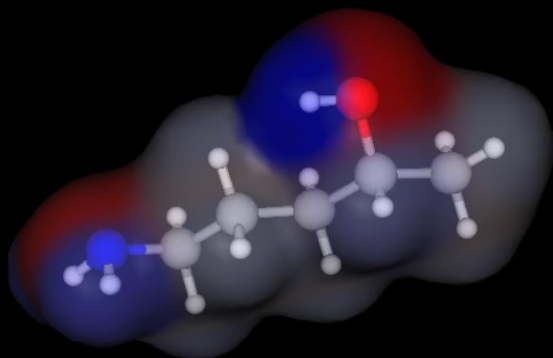
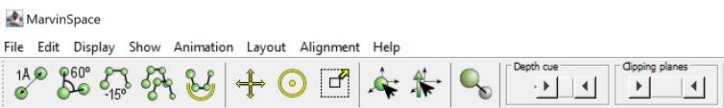
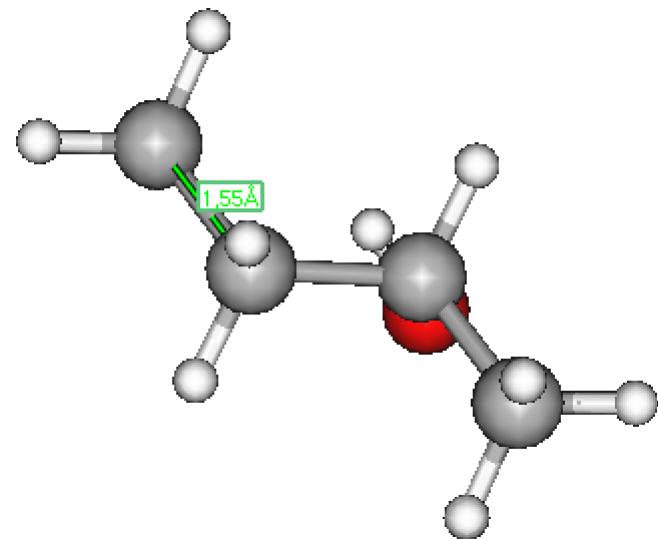
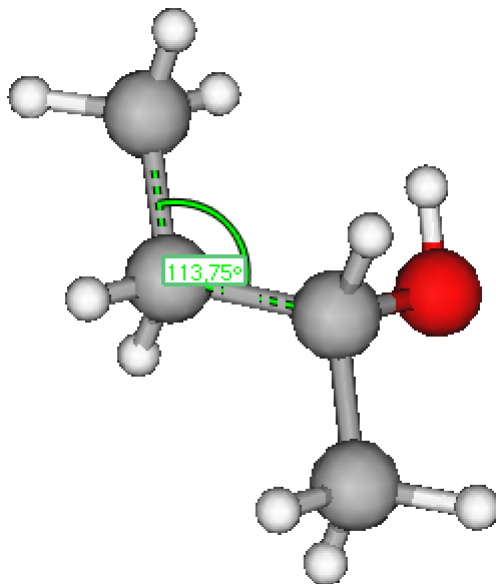


# MarvinSpace –ohjelma

(nykyään erillinen, ennen osa Marvinia)



Erilaisia ominaisuuksia, jotka nyt hankalasti saatavissa (osin buginen):  
sidoskulmat, sidospituudet



Molekyylin 3D-mallinnus ja pooliset sidokset

# MarvinSpace -ohjelma



MarvinSpace -ohjelmasta voi avata MarvinSketch -ohjelman piirtämistä varten. Versio on 17.2.27. (pikanäppäin: ctrl+shift+M)

The screenshot displays the MarvinSpace 17.2.27.0 application window. The main window has a menu bar with File, Edit, Display, Show, Animation, Layout, Alignment, and Help. Below the menu bar is a toolbar with various icons for molecular manipulation, including bond rotation (60°, -15°), translation, rotation, and zooming. To the right of the toolbar are controls for Depth cue, Clipping plane, and Isosurface (set to 0.025). A slider for Min (-0.5) to High (0.5) is also visible.

An About MarvinSketch dialog box is open in the foreground, showing the MarvinSketch logo and the following information:

<b>Product Version:</b>	MarvinSketch 17.2.27.0
<b>Build Date:</b>	2017-02-23
<b>Internal build id:</b>	17.2.27.0-master-6476
<b>Operating System:</b>	amd64 Windows 11 10.0

# MarvinSpace



MarvinSpace

File Edit Display Show Animation Layout Alignment Help

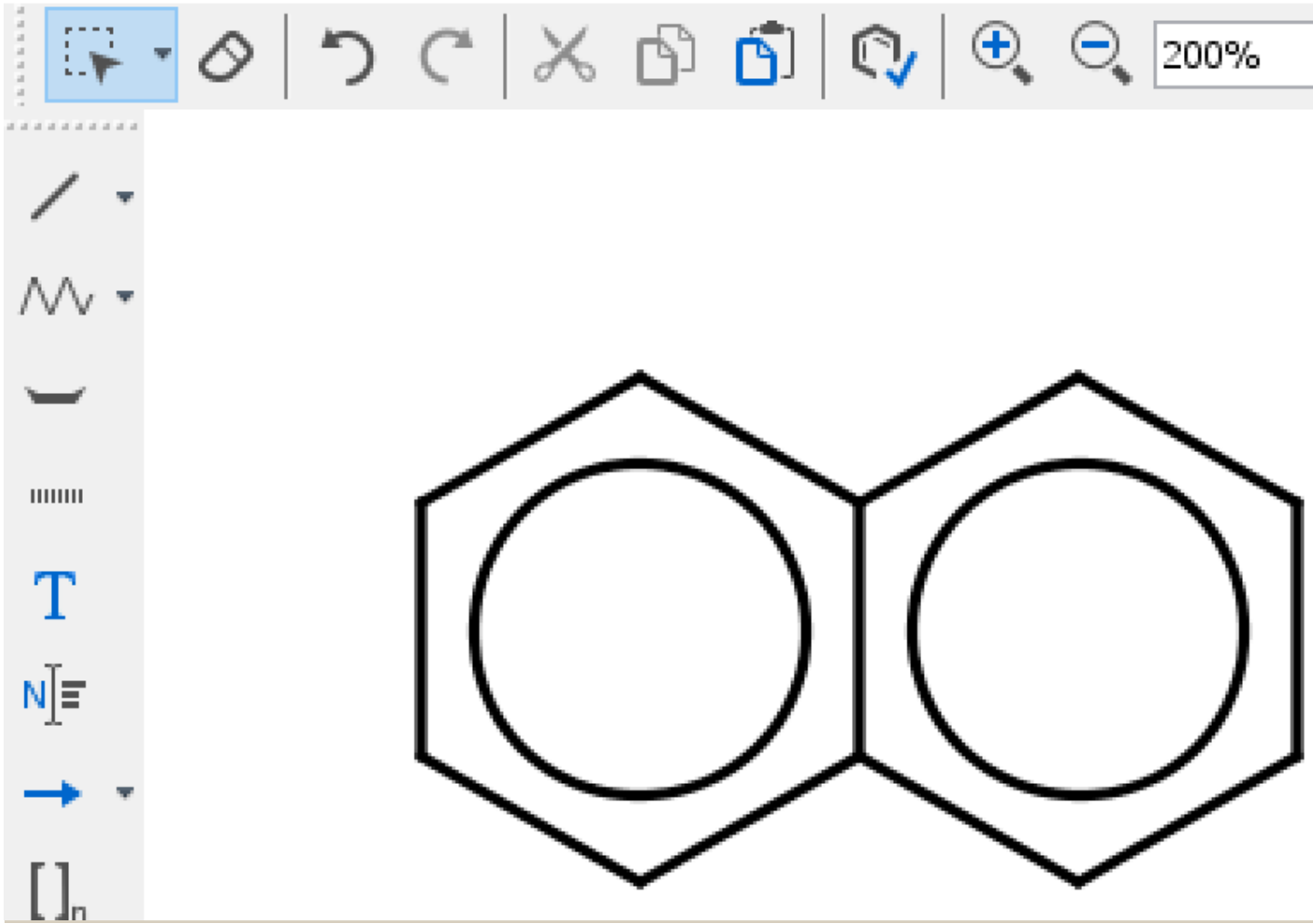
1Å 60° -15° [Rotation icons] [Translation icons] [Zoom icon]

Depth cue [Left] [Right]

Clipping planes [Left] [Right]

Isosurface 0,025

The main window displays four 3D ball-and-stick molecular models of organic compounds. The atoms are represented by spheres: carbon (grey), oxygen (red), and hydrogen (white). The bonds are shown as sticks. The molecules are arranged in a cluster, showing different orientations and conformations. The background is black.

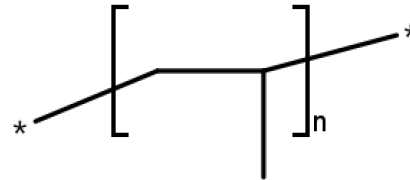
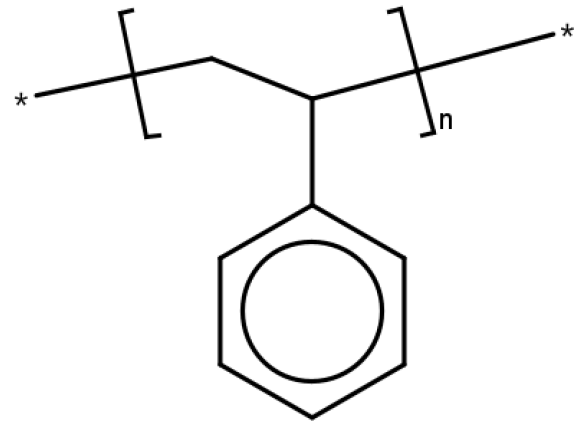


Erilaiset yhdisteet

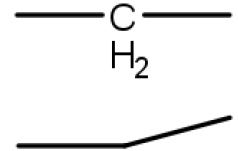
# Polymeerit



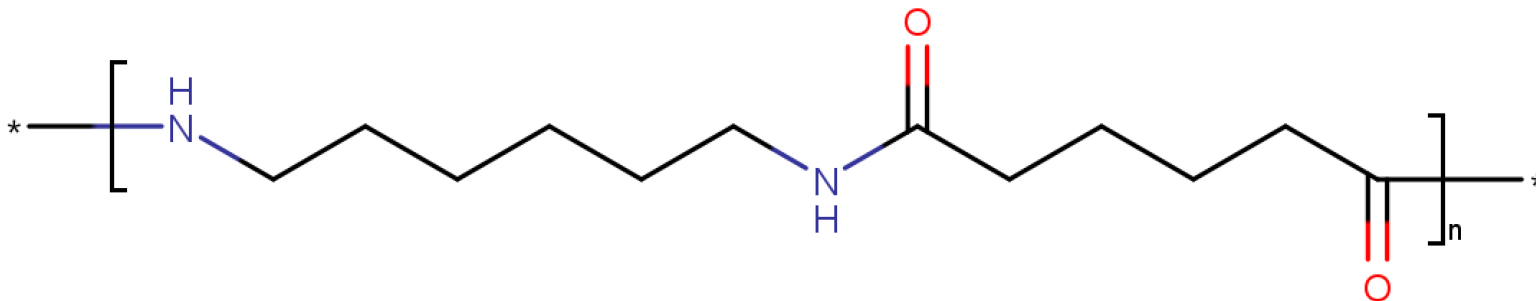
## ADDITIOPOLYMEEREJÄ



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

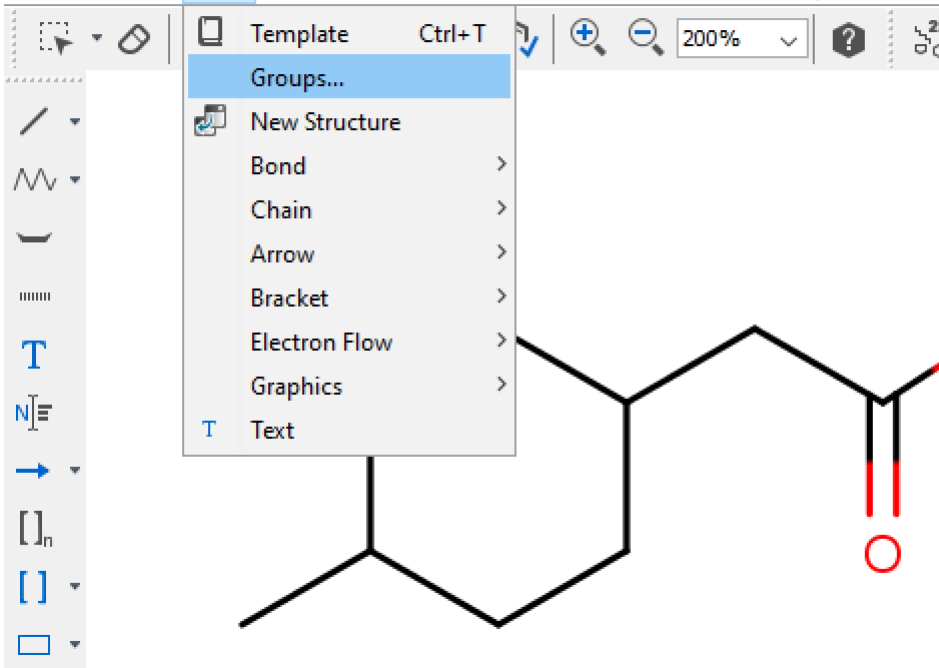


# Orgaaniset suolat



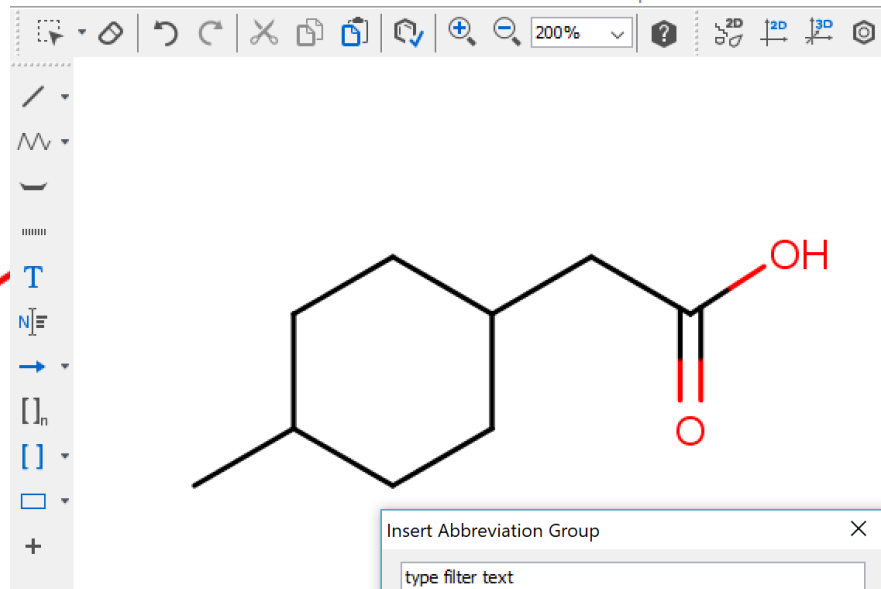
MarvinSketch 17.28

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

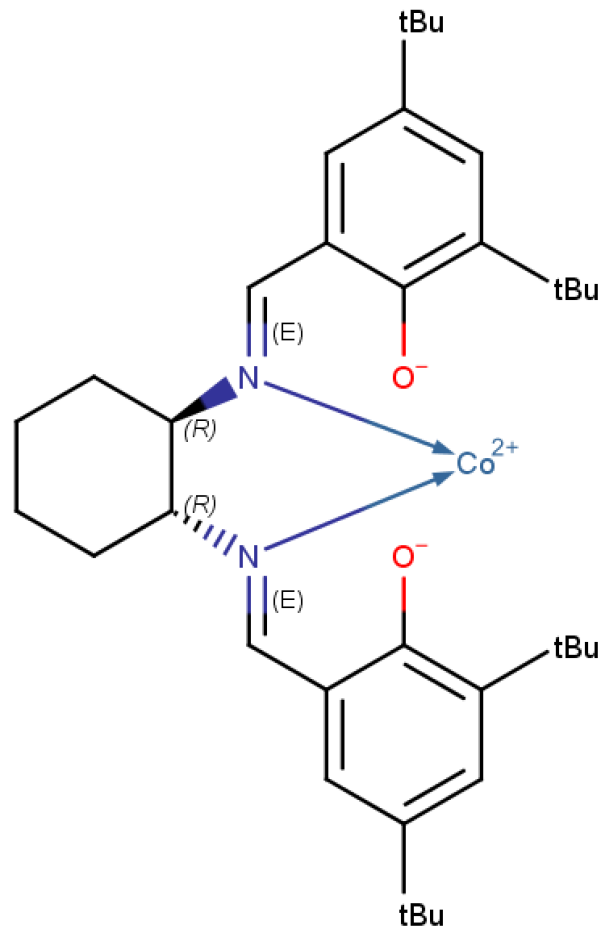
Close




# Kompleksiyhdiste

MarvinSketch 19.2

File Edit View Insert Atom Bond Structure Calculations Services Help



Clean 2D >

 Clean in 3D Ctrl+3

Directed Merge >

---

**Add** >

Remove >

Edit Data...


Edit Properties...


---

Aromatic Form >


---

**H** Explicit Hydrogens

 Data...

 **Absolute Stereo (CHIRAL)**

Multi-Center

 Position Variation Bond

No Structure

Valikot

# Valikot - View



MarvinSketch 17.3.27

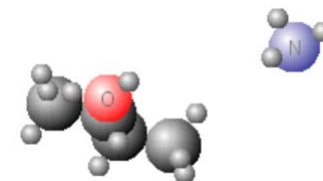
File Edit **View** Insert Atom Bond Structure Calculations Services Help

- 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 software interface. The 'View' menu is open, displaying various options. The 'Advanced' sub-menu is also open, showing options like 'Atom Numbering', 'Atom Properties', 'Atom Mapping', 'Bond Lengths', 'Lone Pairs', 'R-groups', 'R-Logic', 'Valence', 'Ligand Error', and 'S-group Attachments'. The 'Bond Lengths' option is highlighted. To the right, a chemical structure of 3-aminobutan-2-ol is shown with bond lengths labeled: 1.47 (C-N), 1.55 (C-C), 1.56 (C-C), 1.43 (C-O), and 1.55 (C-C). An orange arrow points to the C-N bond.

Mouse mode + - 150% ?

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

CH<sub>3</sub>

H<sub>2</sub>N 1.47

1.55

1.56

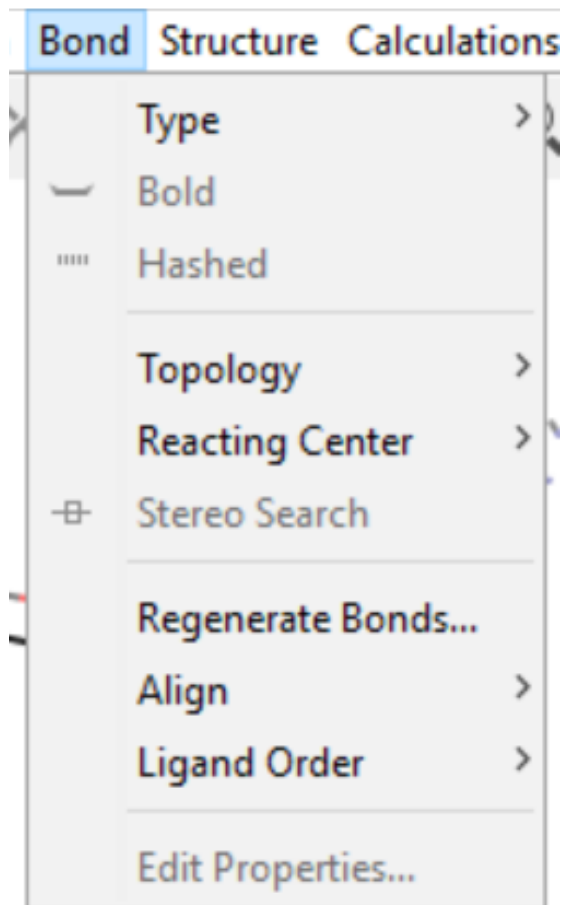
H<sub>3</sub>C 1.43

1.55

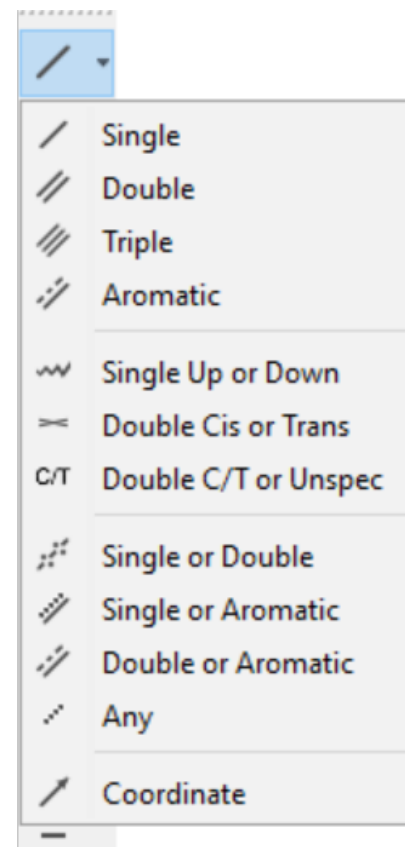
OH

Name: 3-aminobutan-2-ol  
Molecular weight: 89,14  
Formula: C<sub>4</sub>H<sub>11</sub>NO

# 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

The mass spectrum shows a base peak at m/z 74 with 100% relative abundance and a very small peak at m/z 75 with 0.04% relative abundance. The chemical structure is a ball-and-stick model of butanol, with the oxygen atom highlighted in red.

# 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

# Lisää aineistoa - videoita

---



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



# Vesi ja rasvaliukoisuus, logP



Ovatko LogP ja LogD sama asia?

LogD kuvaa yhdisteen kaikkien muotojen jakautumista tietyssä pH:ssa. Toisin kuin logP, joka on pH-riippumaton, logD muuttuu pH:n mukaan.

LogS on yleinen liukoisuuden mittayksikkö. Tämä yksikkö on mol/l-yksiköissä mitatun liukoisuuden 10-pohjainen logaritmi, eli  $\log S = \log(\text{liukoisuus mitattuna mol/l})$ . LogS liittyy suoraan lääkkeen vesiliukoisuuteen ja se määritellään yhteiseksi liukoisuusyksiköksi, joka vastaa 10-perustaista molekyylin liukoisuuden logaritmia mol/l:na mitattuna.