



MarvinSketch

5.12.2020

Supistettu versio

Ari Myllyviita, FM, yhteisöpedagogi (AMK)

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

**Vieraileva tutkija,
Johannesburgin yliopisto, Etelä-Afrikka**



Anni Loukomies, Jari Lavonen ja allekirjoittanut Johannesburgissa, putouksilla

<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

Twititkaa hashtagilla **#marvinsketchsuomi**.

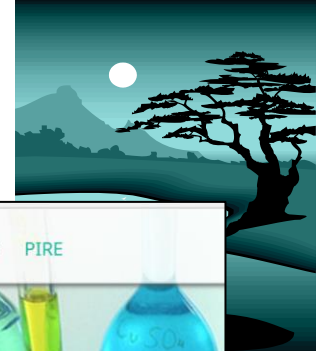
Twitteinä esim. kuvakaappauksia kommenttien kera. Kootaan myös aineistoa erilaisista tilanteista, ongelmista, ideoista, löydöistä.

[#marvinsketchsuomi Tweets](#)

Uutisia

[Päivitys 13.10.2017](#)

[Kaksi MarvinSketch-työpajaa Turussa 7.10](#)



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

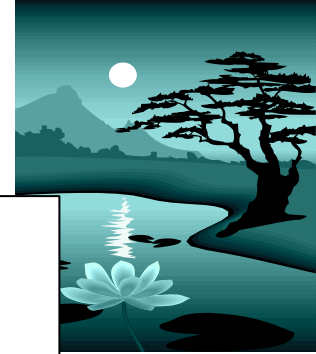
Computex-tapahtuma Taipeiissa 6.-8.6.2018

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-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 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.

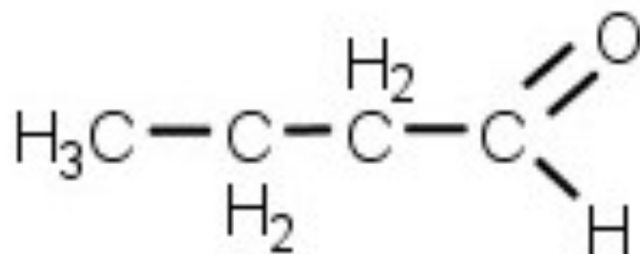
On hyvä määritellä lukiolaisten kanssa ne asiat, joita itse ylioppilaskirjoituksessa käytetään ja mitkä liittyvät mielekkääseen kemian rakenteiden opiskeluun.

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

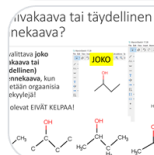
5 kommenttia

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".



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

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)?
accounts.chemaxon.com

Avaa Tallenna ^ Peruuta ×

Mitä haluat tehdä seuraavalle license.cxl (22.1 kt)?
accounts.chemaxon.com

Avaa

Tallenna





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.

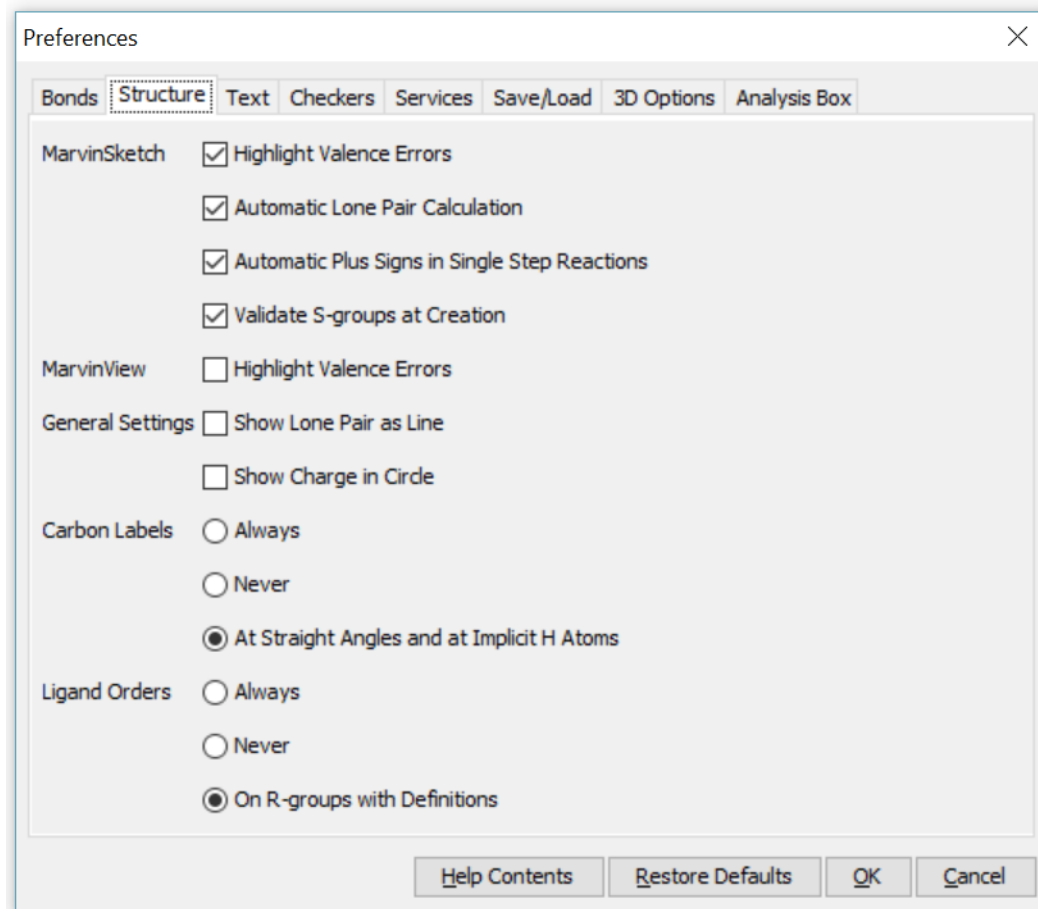
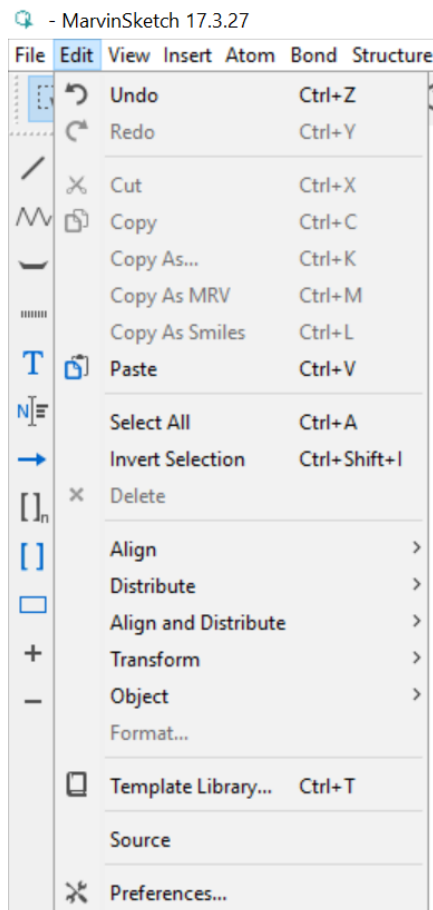
Tämä sähköinen kirja sisältää:

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

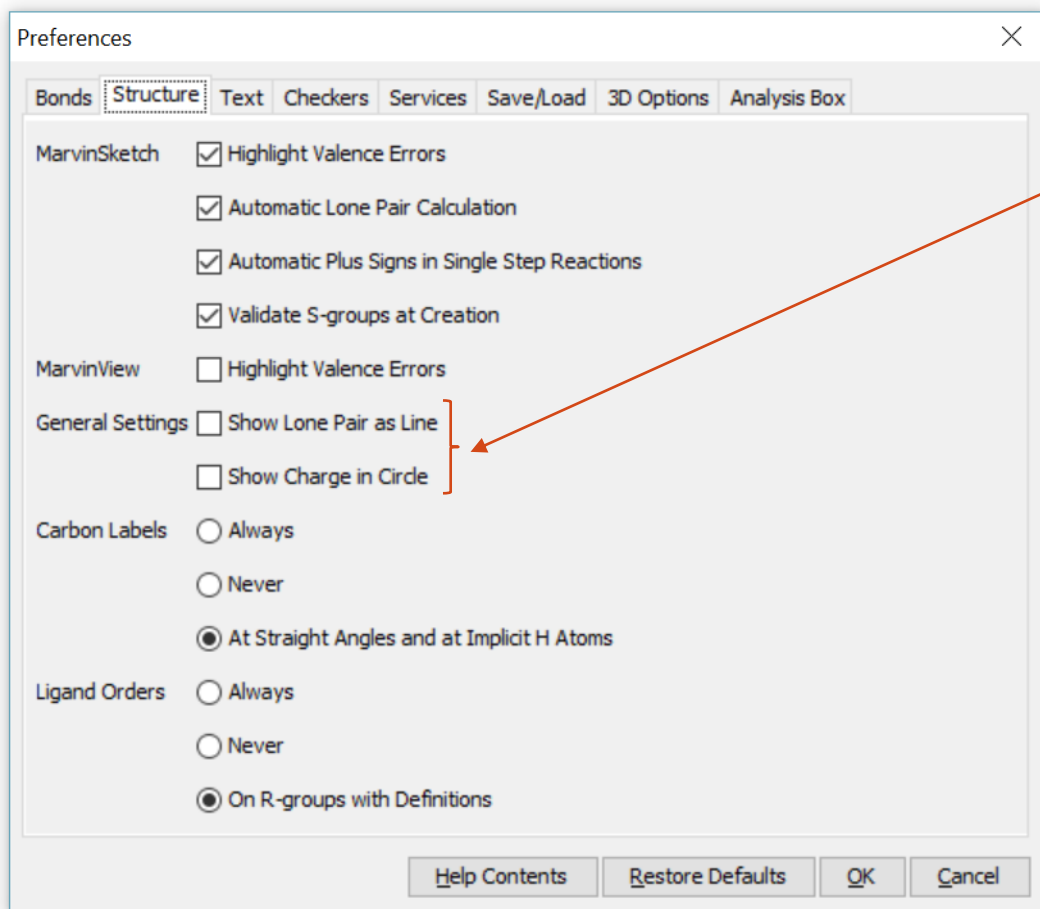
e-Oppi: Orbitaali - MarvinSketch

Ohjeita ohjelman käytöstä lukiolaisille ja opettajille

Valikot – Edit – Preferences...



Vapaat elektroniparit näkyviin



EI TOIMI NORMIOHJELMALLA?

Valikot - View



MarvinSketch 17.3.27

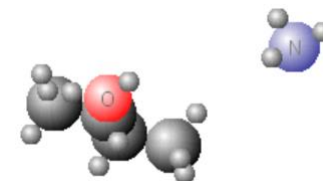
File Edit **View** Insert Atom Bond Structure Calculations Services Help

- 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 of the menu, 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 nitrogen atom in the structure.

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

Advanced sub-menu options:

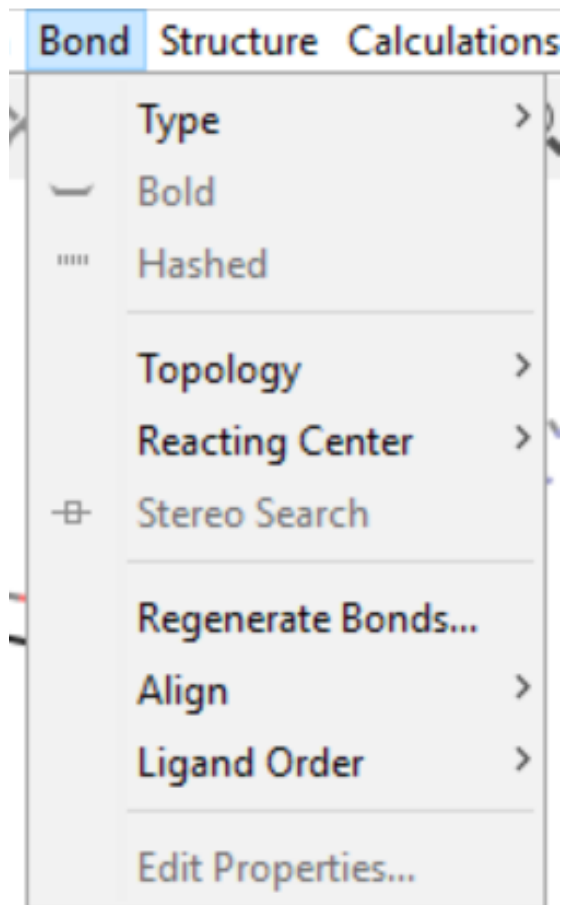
- Atom Numbering
- Atom Properties
- Atom Mapping
- Bond Lengths
- Lone Pairs
- R-groups
- R-Logic
- Valence
- Ligand Error
- S-group Attachments

Chemical structure: 3-aminobutan-2-ol

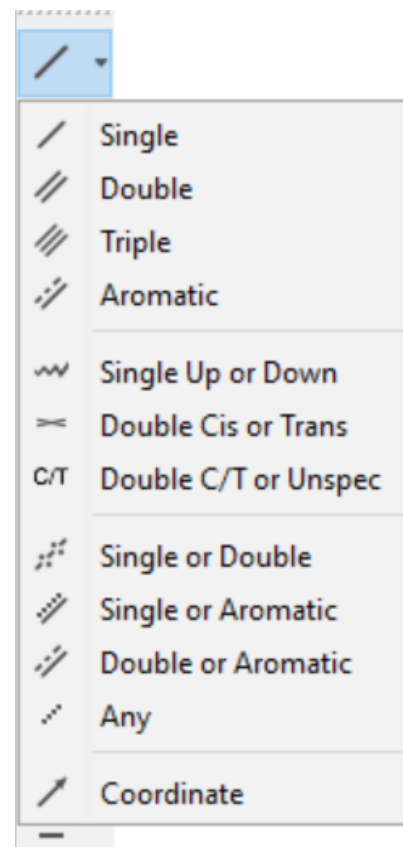
Bond lengths: 1.47, 1.55, 1.56, 1.43, 1.55

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

Ball-and-stick model of ethanol ($C_4H_{10}O$).

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

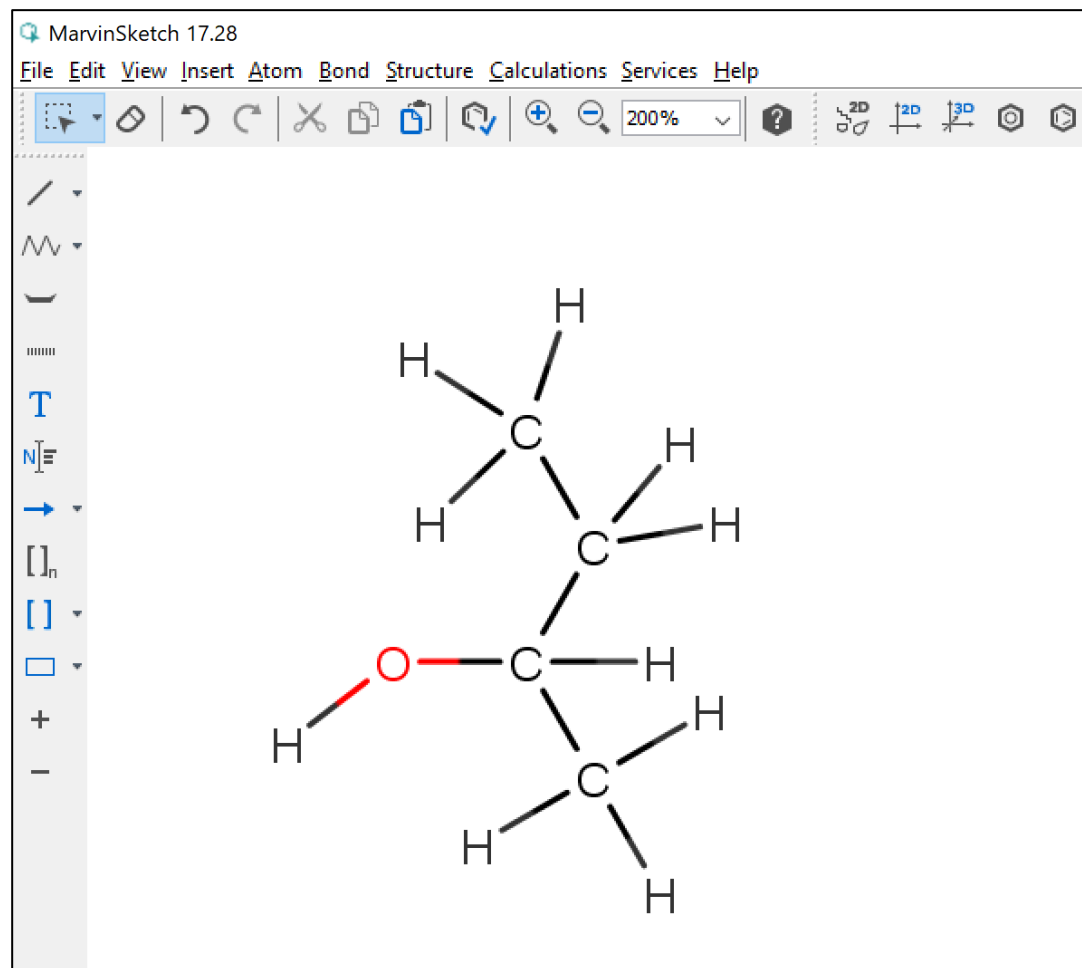
Charge

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

MarvinSketch

Pedagogisia valintoja?

1. Viivakaava vai täydellinen rakennekaava?

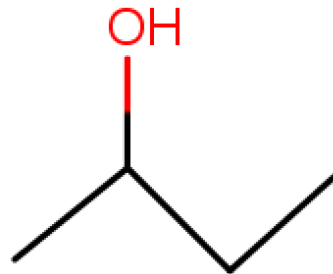


Joko viivakaava tai täydellinen rakennekaava?

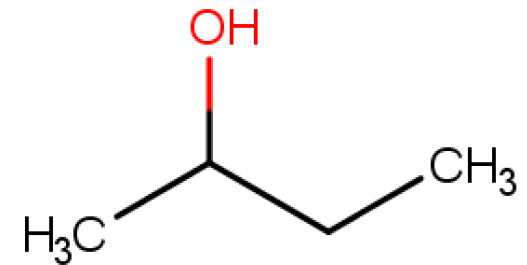
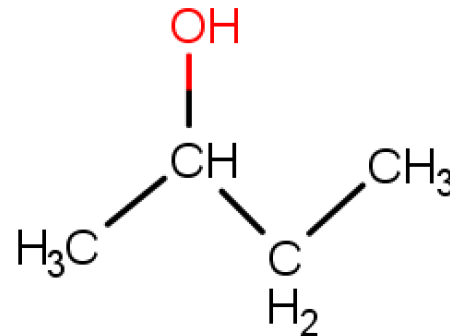
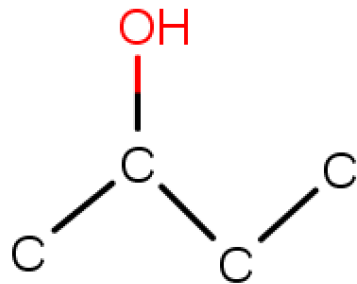
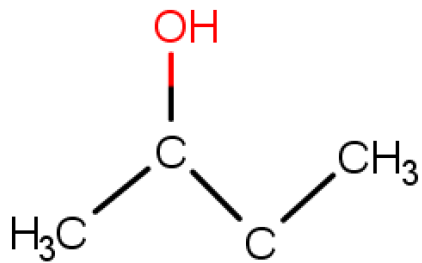
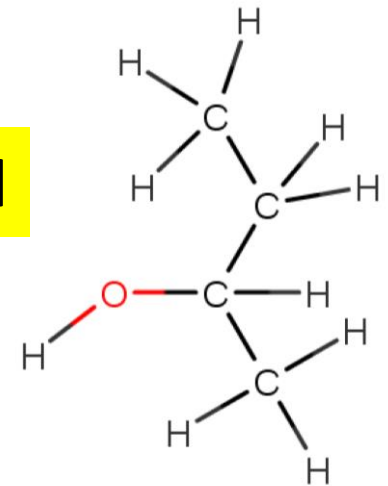


Joko viivakaava tai täydellinen rakennekaava

JOKO



TAI



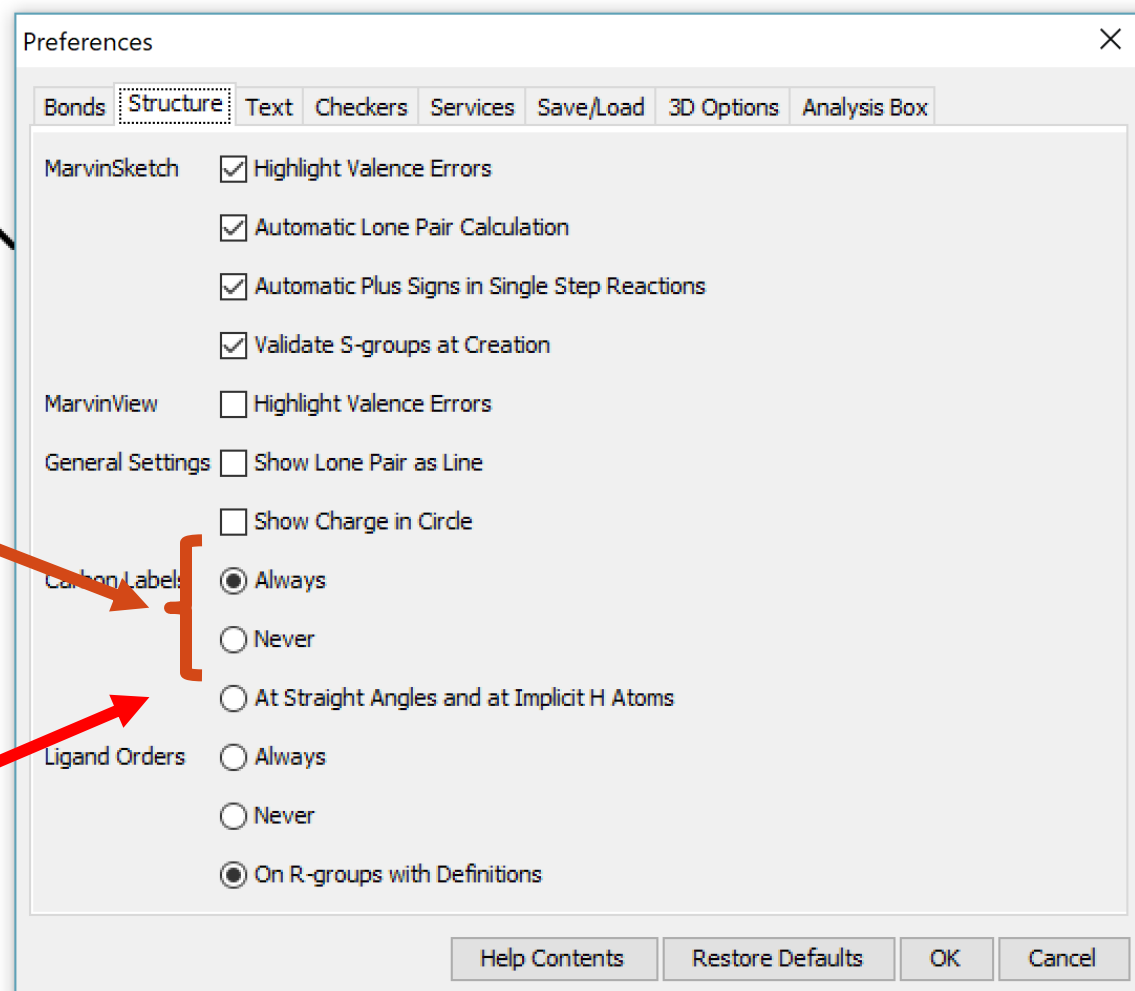
VAIHE 1: Hiilet näkeviin tai ei?



VAIHE1: Viivakaava tai täydellinen rakennekaava

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

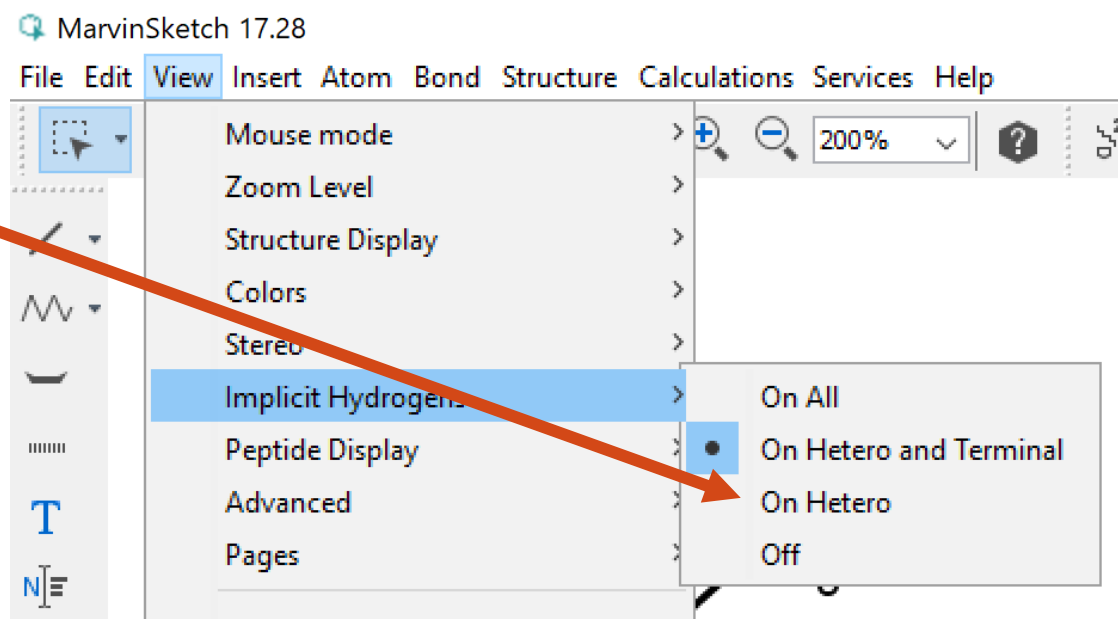
EI TÄTÄ



VAIHE 2: "Implisiittiset vedyt" pois



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

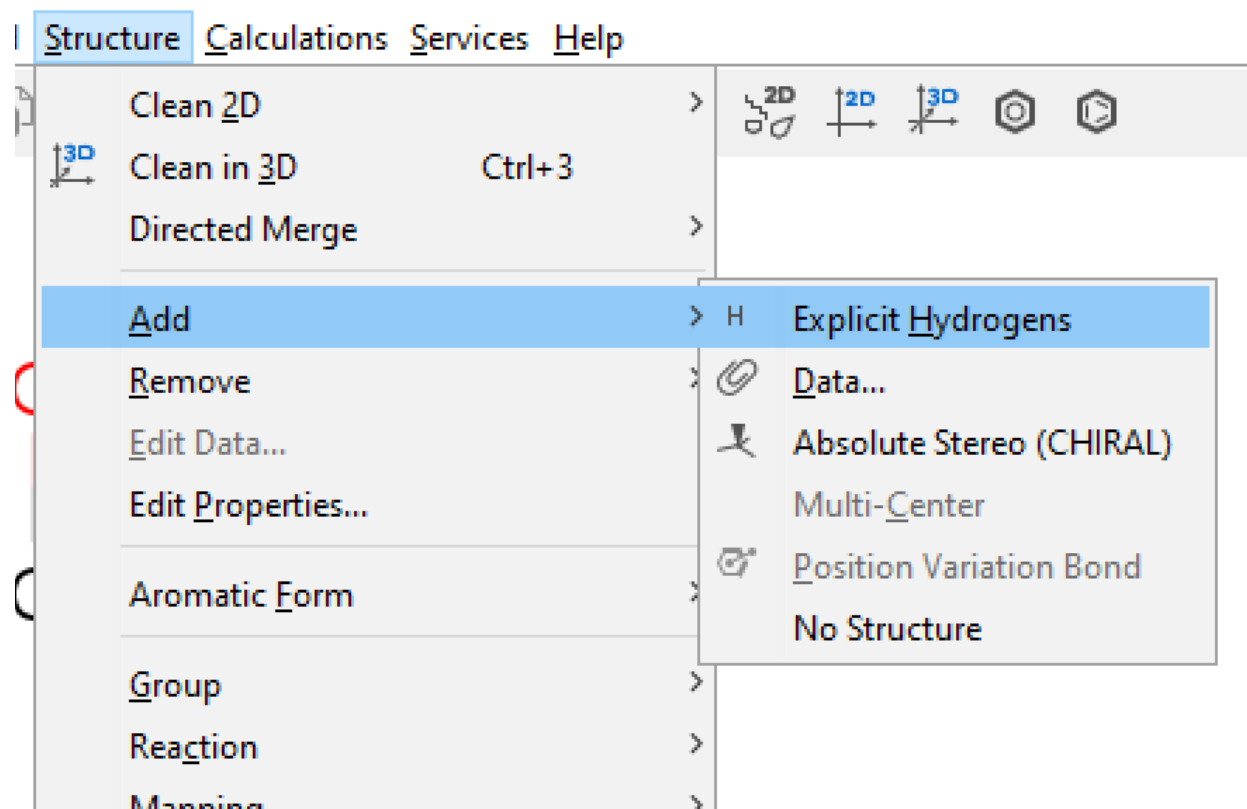


Vaihe 3: Jos täydellinen rakennekaava →



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

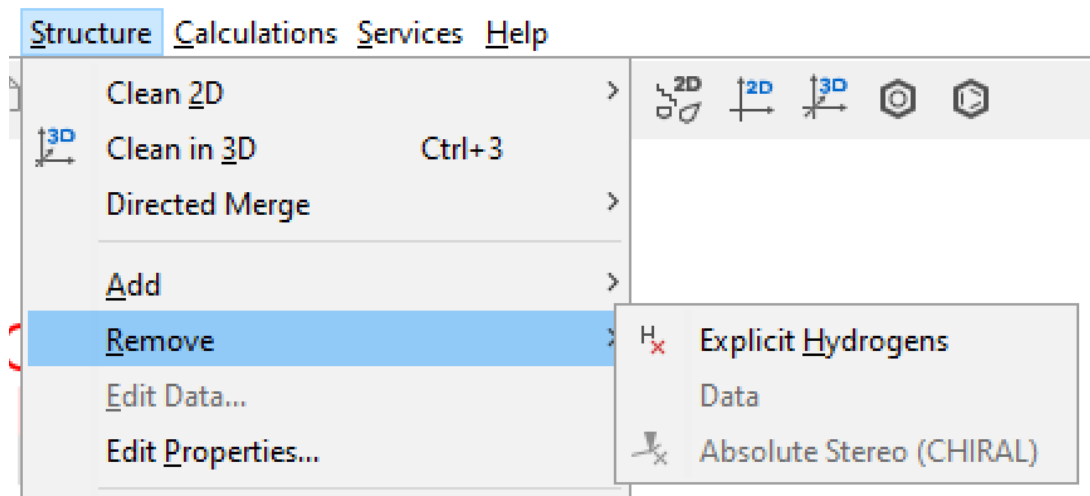
Structure-kohdasta **Add Explicit Hydrogens**



Paluu viivakaavaan?



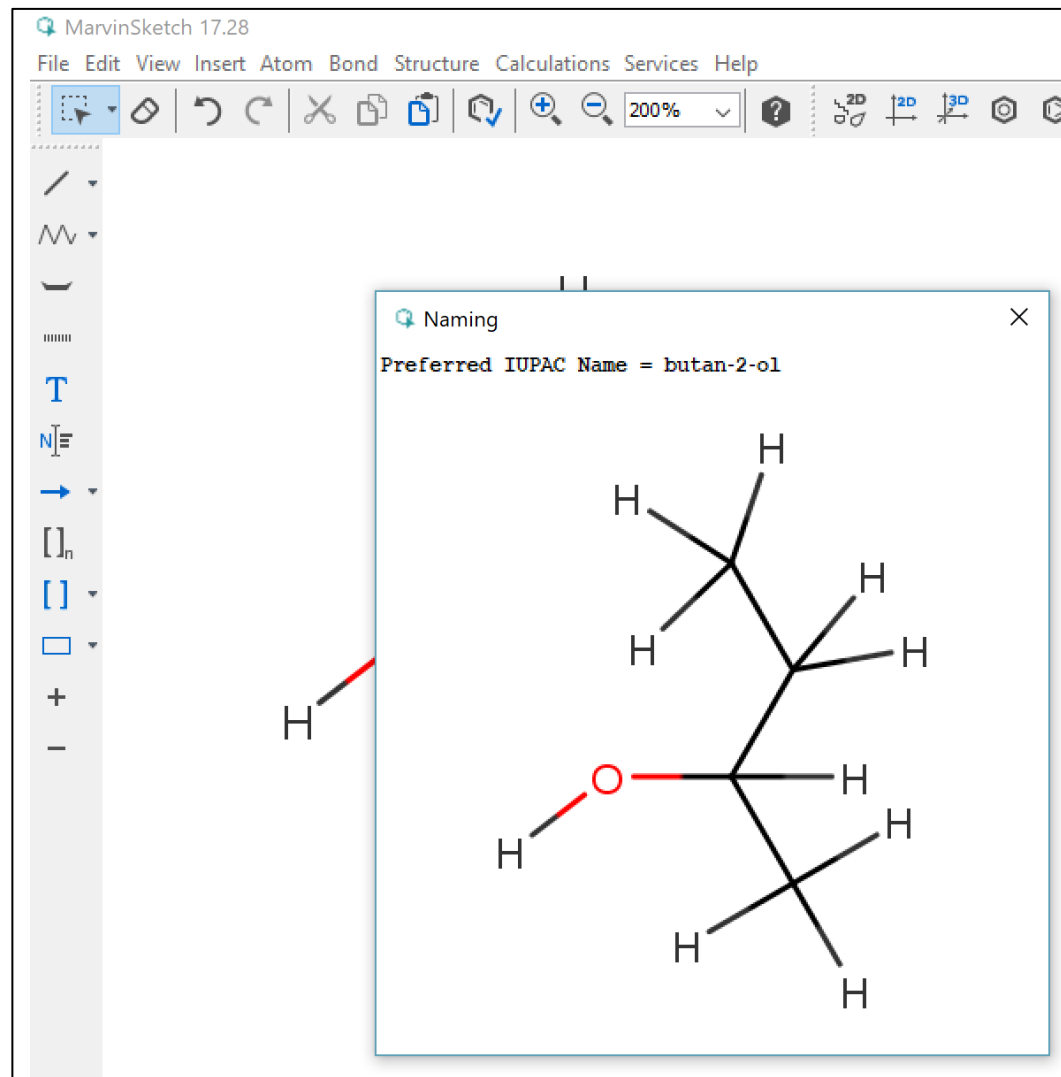
Jos haluaa palata viivakaavaesitysmuotoon. Poistetaan vedyt (viereinen kuva) ja poistetaan hiiliatomien merkinnät (Preferences –osiosta Carbon labels → Never)



MarvinSketch

Pedagogisia valintoja?

2. Nimeämisen opetus

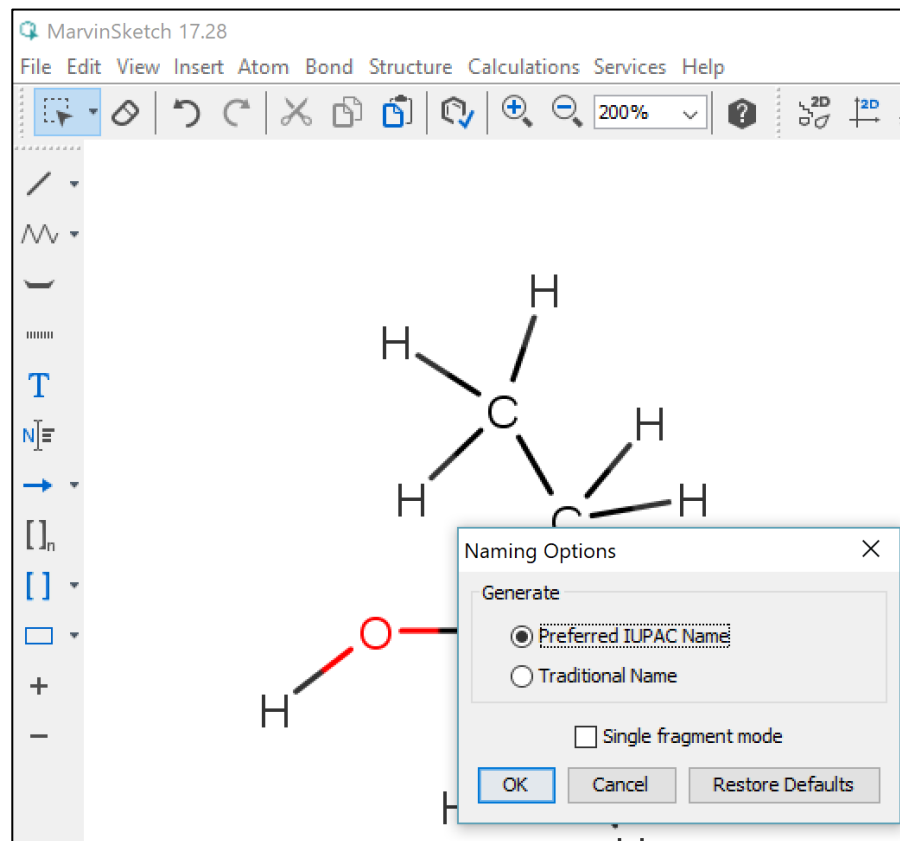


MarvinSketch nimeää molekyylit (myös Abitti-versiossa)



Miten kurssilla opetetaan orgaanisten molekyylien nimeäminen? Miksi?

MarvinSketch tuottaa nimet ja toisinpäin – nimestä rakenteen.



Vapaat elektroniparit



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

Mouse mode > [Zoom] 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

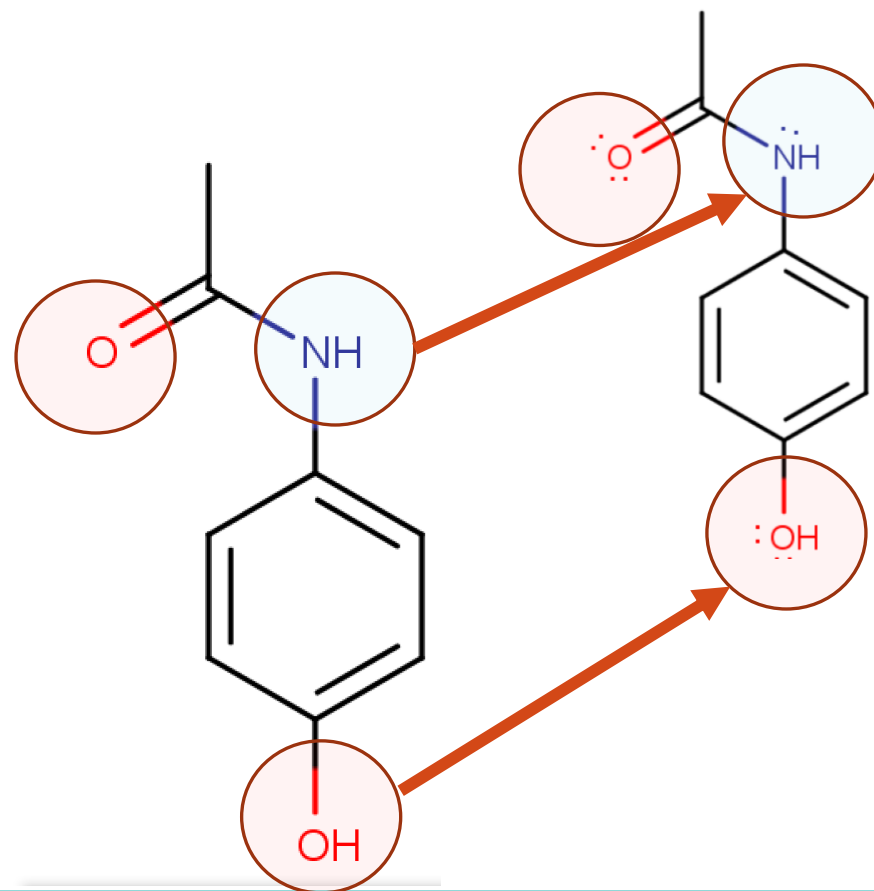
✓ Ligand Error

✓ 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

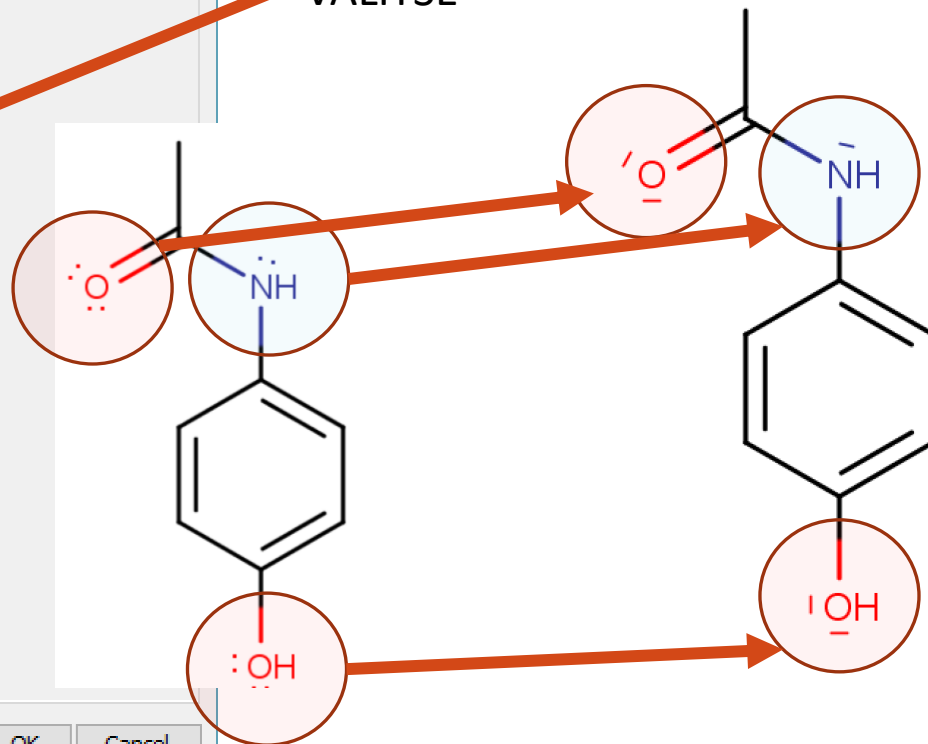
General Settings Show Lone Pair as Line
 Show Charge in Circle

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



Lisää aineistoa - videoita



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