

MarvinSketch 4 – MarvinSpace ja kolmiulotteiset kuvat

12.3.2019

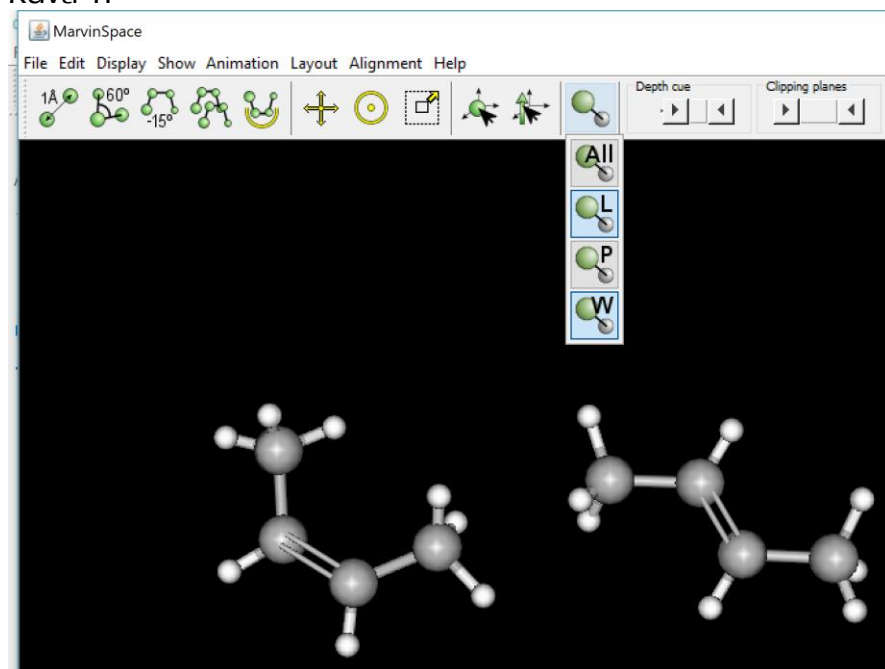
MarvinSpace on MarvinSketch-ohjelma apuohjelma (Java-pohjainen). Sillä voidaan tuottaa MarvinSketch-ohjelmalla **piirretyistä molekyyleistä 3D-malleja**. Toiminto on mahdollista asentaa myös ikoniksi, mutta prosessi on monimutkainen (kirjassa tämä on ohjeistettu opettajia varten). Käytännössä on hyödyllistä opetella **näppäinkomento: ctrl+shift+M**.

MarvinSpace kääntää 3D-malliin kaikki pöydälle olevat molekyylit. Kannattaa hakea mielekäs asetelma, jos halutaan verrata eri molekyylejä 3D-ympäristössä. Siirtäminen ja erikseen pyörittäminen ei onnistu MarvinSpace-ympäristössä eli uuden asetelman rakentaminen on helppoa tehdä palaamalla 2D-ympäristöstään ja järjestää molekyylit siellä.

Jos siirryttyä 3D-malliin vedyt eivät näy, vaakavalikosta haetaan kohta (vaalean vihreä pallo ja pieni harmaa pallo), jolla ne saadaan näkyviin.

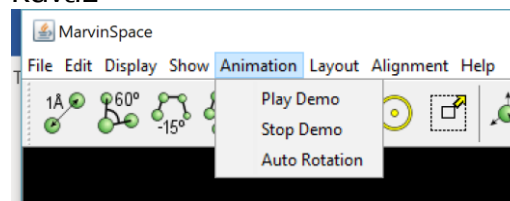
Jos valikko ei tule näkyviin, se on jäänyt mustan alueen taakse. Tällöin sulje ikkuna ja avaa uudelleen MarvinSpace, välttä mustan alueen klikkaamista.

Kuva 1.

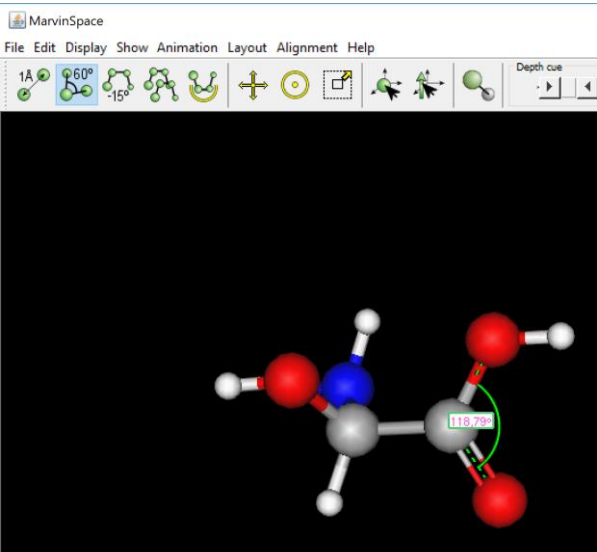
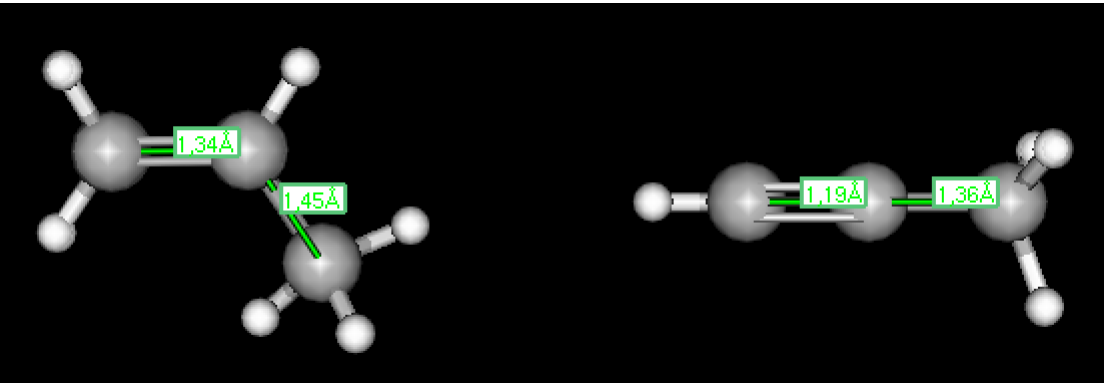


MarvinSpace -ohjelmassa voi pyörittää molekyylejä. Animation-valinta mahdollistaa myös automaattisen rotaation (Auto Rotation).

Kuva2



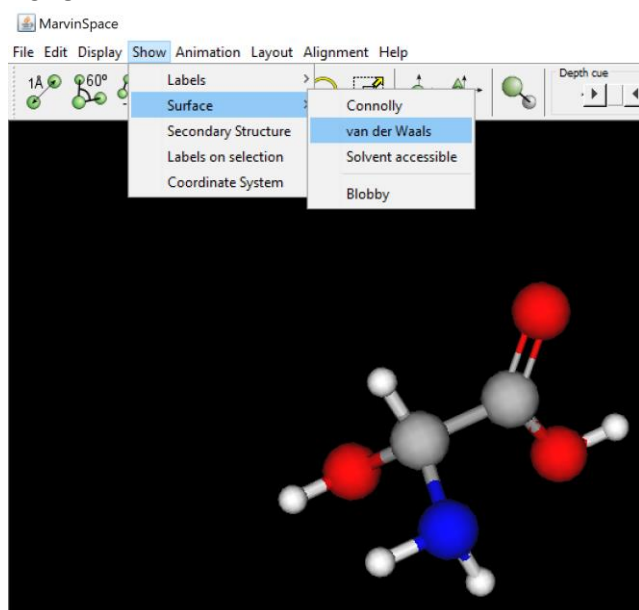
Seuraavassa muutamia esimerkkejä ja MarvinSpace-ohjelman mahdollistamat lisätoiminnot (sidoskulmat, sidospituudet ja elektronitiheyskuvat).

Kuva 3 	Sidoskulman saa näkyviin valitsemalla toisen painikkeen (toinen vasemmalta) ja klikkaamalla kolme vierekkäistä atomia. Sidoskulmat ovat laskennallisia, eivät todellisia. Sidoskulmiin vaikuttaa sidoksen atomien muu ympäristö, sen vuoksi sidoskulmat eivät noudata esim. VSEPR-teorian mukaisia sidoskulmia.
Vastaavasti sidospituuden saadaan ensimmäisestä painikkeesta. Sidospituuden on merkitty vanhalla yksiköllä eli Ångströmillä¹ (10^{-10} m eli 0,1 nm eli 100 pm).	
Kuva 4 	

¹ Yksikkö on nimetty ruotsalaisen fyysikon Anders Jonas Ångströmin mukaan

Elektronitiheyskuvat

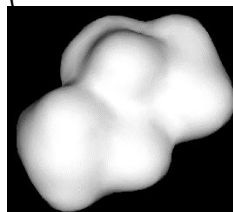
Kuva 1



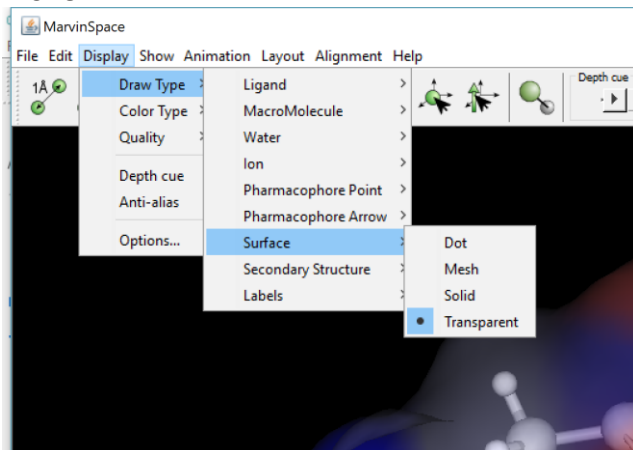
MarvinSpace-ohjelmassa voidaan näyttää molekyylien poolisuus, tässä elektronitiheyskuvia, tämän ohjeen mukaan. Tässä on kolme vaihetta:

1. Tuotetaan elektronipilvi (ilmestyy harmaana massana molekyylin ympärille (kuva 1).
2. Määritellään em. elektronipilvi läpinäkyväksi (kuva 2).
3. Väritetään poolisuus erot "elektrostaattisten potentiaalien" eron perusteella (Kuva 3.)

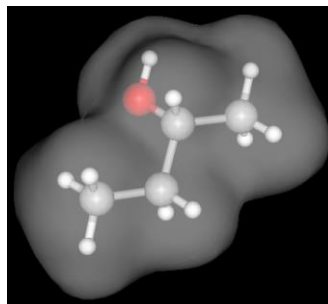
(ao. kuvassa 2-butanoli)



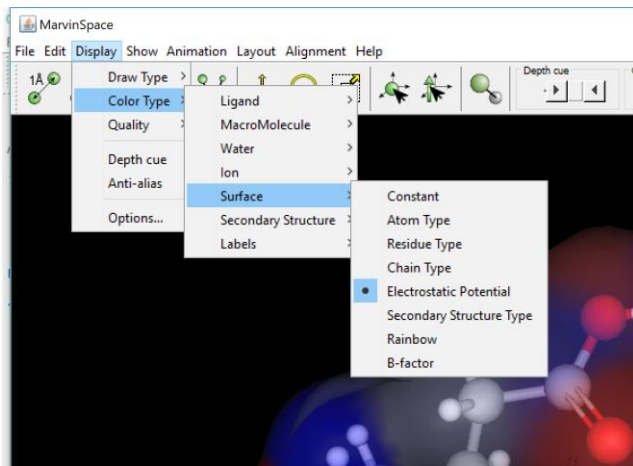
Kuva 2.



Elektronipilven saa läpinäkyväksi valitsemalla Display | Draw Type | Surface | Transparent. Näin saadaan näkyviin pallotikkuesitys elektronipilven sisältä.



Kuva 3.



Elektronipilvessä saadaan näkyviin elektronitiheyden poikkeamat (poolisuuden) valitsemalla Display | Color Type | Surface | Elektrostaattinen Potential.

