



Ketcher vs. MarvinSketch

5.9.2025

Ari Myllyviita, FM, yhteisöpedagogi (AMK)
Väitöskirjatutkija

Kemian ja matematiikan lehtori,
Helsingin yliopiston Viikin normaalikoulu

Oppikirjailija, e-Oppi
Opettajakouluttaja, ChemEdu - Myllyviita

Kurssin sisältö



I OSA (1h)

- Miksi Marvin ja miksi Ketcher?
- Lataaminen, asentaminen ja lisenssi (MarvinSketch)
- Abitti2 - Ketcher
- **Ketcherin perusteet:**
Molekyylien piirtäminen, perusasetukset

• II OSA (1h)

- **Ketcher toiminnallisuudet** ja MarvinSketch -vertailu (LOPS:in tarpeet)

III OSA (1h)

• **Ketcherin käyttö**

- Erilaisten yhdisteiden (mm. epäorg, polymeerit) piirtäminen
- Reaktioyhtälöt
- **Kemian opetuksen tulevaisuus**
 - MarvinSketchin erityisominaisuudet ja niiden puuttuminen Ketcheristä
 - Yhdisteiden nimeäminen ja analysointi (massaspektrit ja NMR)
 - MarvinSpace ja/tai 3D-mallintaminen

Mihin kemian opetusta suunnataan? Kuka suuntaa?



Mitkä asiat muuttuvat, jos Ketcher on ainut mallintamisen ohjelma kemian opetuksessa (**jos sitä mallintamisen ohjelmaksi edes voi kutsua**)

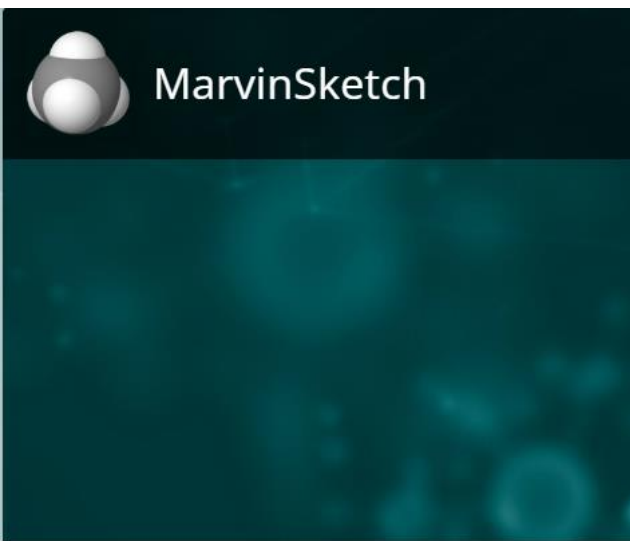
Molekyylien kuvaaminen – Ei 3D-mallinnusta eli avaruusgeometrian näkökulma jää pois opetuksesta.

Molekyylien piirtäminen – vapaat elektroniparit, isomeria – Ketcher ei tuota vapaita elektronipareja esityksiin, isomeria tuottaminen merkittävästi huonompi

Spektroskopian työkalut – Ei massaspektrejä (Marvinin MS-spektrit eivät varsinaisia spektrejä) eikä NMR-spektroskopiaa (mikä on tärkeä osa spektroskopian tulevaisuuden osaamista), IR-spektrejä ei ole kummassakaan

Molekyylien ja yhdisteiden nimeäminen, piirtäminen nimestä (olkoonkin englannin kielinen) – Palataanko orgaanisten molekyylien nimeämisen opiskeluun nykyistä laajemmin (ajan käyttö?)

<https://peda.net/p/myllyviita/OrbitaaliMarvinSketch2painos>



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 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.

Orbitaali - MarvinSketch II

Tämä kirja on uudistettu versio aiemmasta Orbitaali - MarvinSketch -kirjasta. Kirjaan on lisätty toiminnallisia videoita (opastusvideoita ja huomioita erilaisista pulmakohdista). Kirja tähtää Abitissa

+ Luo [Menu] [Star] [Share] [Info]

[Menu] [Share] Osta (0€)

Oppimateriaalit > Kemian materiaalit > MarvinSketch

MarvinSketch	↑
Ajankohtaista	
MarvinSketchin ominaisuudet	
Koulutukset	↓
Ohjeet	↓
Tutkimus: MarvinSketchin	

MarvinSketch

MarvinSketch -kirja lukion käyttöön

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

bit.ly/marvinsketch

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

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

Twitter-koonti

Twiitkaa hashtagilla #marvinsketchsuomi.

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

[#marvinsketchsuomi Tweets](#)

Ketcher

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



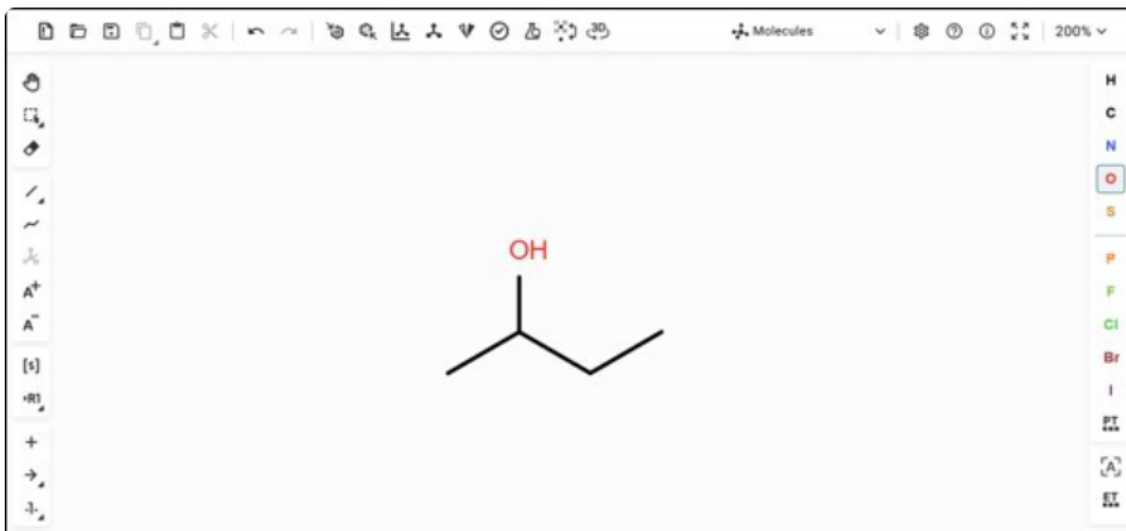
Ketcherin käyttöönnotto



Ketcher on selainpohjainen ohjelma

Ohjelmaa voi käyttää [selaimella](#) tai sen voi [ladata työpöytäversioksi](#) (siinä toimii selaimella). Ketcher on ilmainen piirto-ohjelma.

Työpöytä muistuttaa MarvinSketchin työpöytää.



MarvinSketchin ja Ketcherin lataaminen

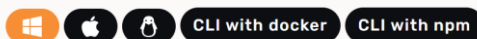


MarvinSketch

Opettaja lataa

- ohjelman (vaatii ChemAxon käyttäjätunnuksen) ja
- hankkii ja jakaa lisenssin (Academic Teaching Licence)

Marvin 25.1.7



Windows

Includes Marvin and connected webservice

64 bit



Portable Zip Archive



Ketcher

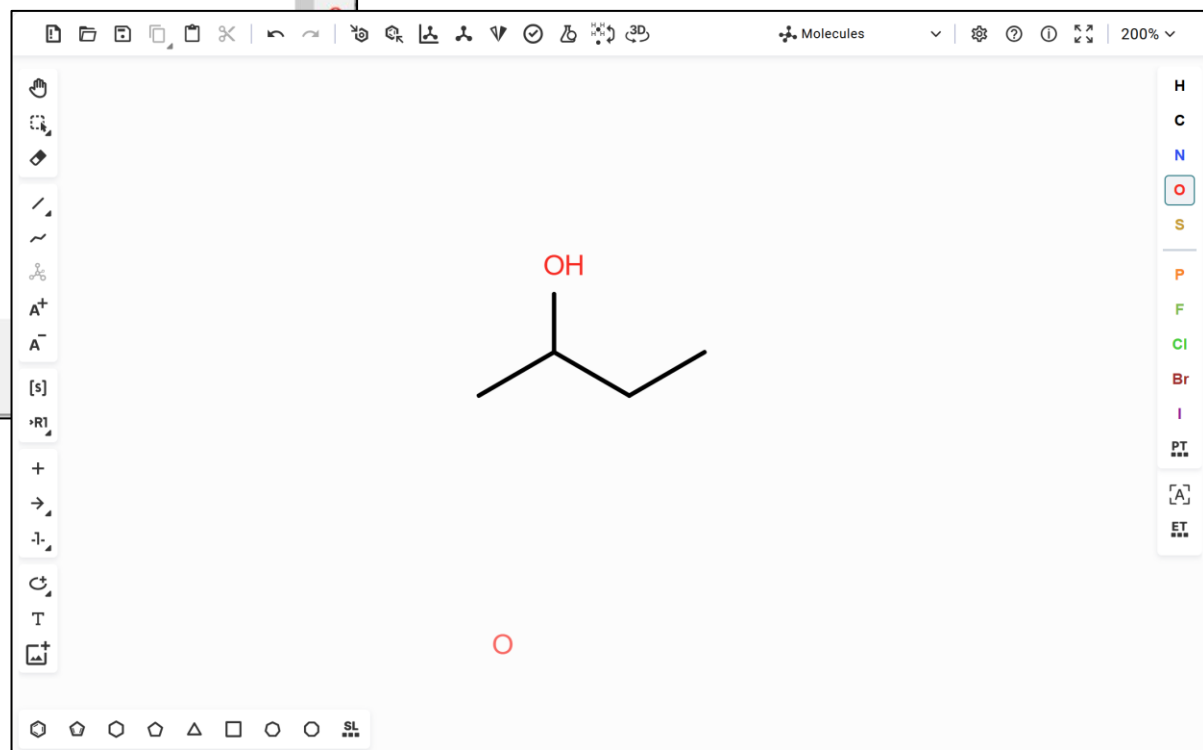
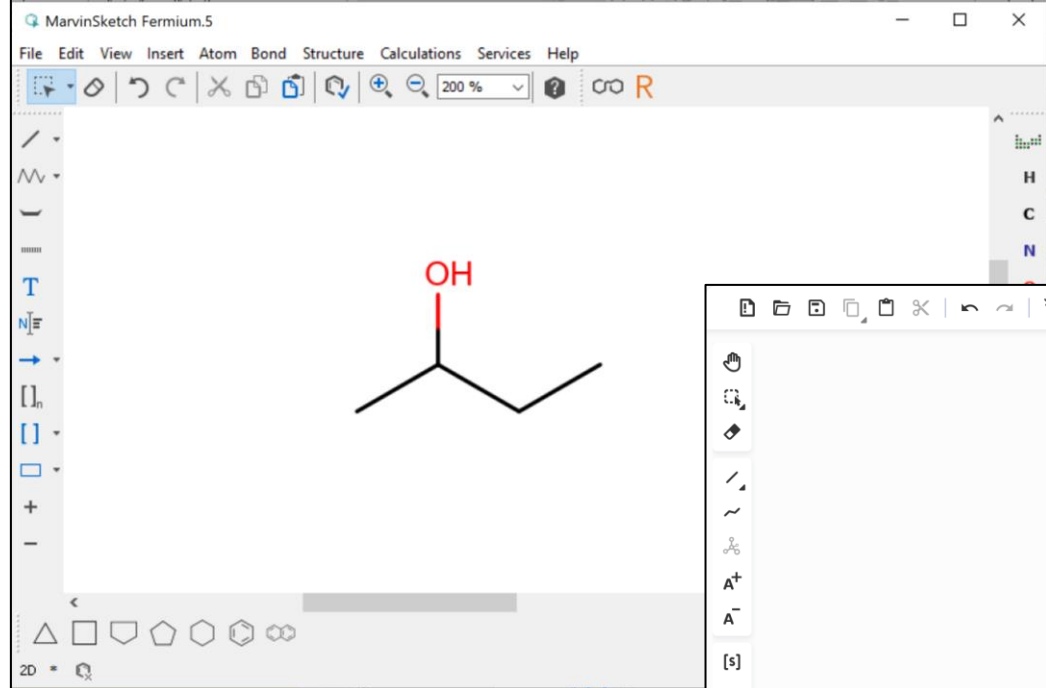
Ohjelmaa voi käyttää selaimella tai sen voi ladata työpöytäversioksi (siinä toimii selaimella)

Ketcher 3.0.0

Ketcher distributions

[Ketcher 3.0.0 standalone](#)

[Ketcher 3.0.0 remote](#)



Perustoiminnot, molekyylin piirtäminen

MarvinSketch ja Ketcher vs. keskeiset sisällöt (lukion OPS)



MarvinSketch

KE2

- siduskemiaa, poolisuus

KE3

- hiilen yhdisteiden rakenteiden mallintaminen
- rakenneisomeria
- stereoisomeria hiiliyhdisteissä
- spektroskopia (NMR)

KE4

- reaktiot
- polymeroitumisreaktiot

KE5

- kompleksiyhdisteet, koordinaatiosidos

KE6

- Tasapainoreaktiot
- LogP, LogD

Ketcher

KE3

- hiilen yhdisteiden rakenteiden mallintaminen
- rakenneisomeria
- stereoisomeria hiiliyhdisteissä

KE4

- reaktiot
- polymeroitumisreaktiot

KE5

- kompleksiyhdisteet, koordinaatiosidos

KE6

- tasapainoreaktiot

MarvinSketch -tiedoston avaus Ketcherillä



Avaa tiedosto (Open File) ja sitten etene klikkaamalla kohdasta **Open from file**.

Valitse joku MarvinSketch -tiedosto

Open structure -ikkunassa valitse **Open as New Project**.

Ohjelma avaa MarvinSketch -tiedoston.

PASTE FROM CLIPBOARD

or drag file here

Image Recognition service is not available

Open structure

```
<?xml version="1.0" encoding="UTF-8"?><cml xmlns="http://www.chemaxon.com" xmlns:MarvinGUI="http://www.chemaxon.com" xmlns:saveproperties="http://www.chemaxon.com" saveproperties="false"><MHead><MarvinGUI><mprop name="saveproperties" dataType="xsd:boolean" value="false"/></MHead><MDocument><MTextBox id="o1" color="#000000" toption="NOROT" fontScale="10.0" text="Markovnikovin s\u00e4\u00e4nt\u00f6 (vetykloridi): vety menee kaksoissidoksessa siihen hiileen jossa on entisest\u00e4n eniten vetyj\u00e4" /></Field><MPoint x="-13.10" y="100" /></MDocument></cml>
```

Cancel Open as New Project Add to Canvas

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, Help. Below the menu bar is a toolbar with icons for selection, erasing, undo, redo, cut, copy, paste, and zoom. The main workspace is a large white area with a central grey box labeled 'Työpöytä' (Workbench). To the left of the workspace is a vertical toolbar with icons for drawing lines, curves, polygons, and text. To the right is a vertical toolbar with element symbols: H, C, N, O, S, F, P, Cl, Br, I. At the bottom of the workspace is a horizontal toolbar with icons for pre-defined structures: triangle, square, pentagon, hexagon, benzene ring, and fused rings. Red arrows point from the text labels to these icons. The text '2D' is visible in the bottom left corner.

Ketcher-in työpöytä



The screenshot shows the Ketcher software interface. The central workspace displays a skeletal structure of 2-butanol with an OH group in red. The interface includes a top toolbar with file and edit icons, a left sidebar with tool categories, and a central workspace with a drawing toolbar. A red line connects the 'Text' tool in the sidebar to the Text Editor window on the right.

Text Editor

B I X² X₂ Ω Font Size 13

Text:

symbols δ ε ζ η θ
ι κ λ μ ν ξ ο π
ρ σ τ υ φ χ ψ ω
°C °F Å ° ħ ± % √
← → ↵ ↶ ↷ Π Σ ∞
∂ Δ ∫ ≈ ≠ ≤ ≥

Cancel Apply

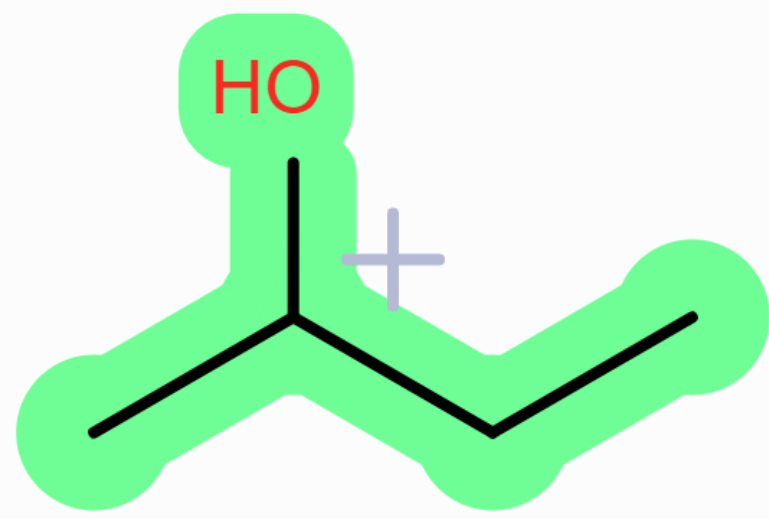
Molekyylin siirtäminen ym.



A screenshot of a chemistry software interface. At the top is a toolbar with icons for file operations (save, copy, paste, delete), editing (undo, redo), and chemical functions (add atom, delete atom, bond types, etc.). On the left is a vertical toolbar with icons for selection (hand), zoom (magnifying glass), pan (arrow), and other tools. The main workspace shows a molecule with a green highlight and a red 'HO' group. A dashed blue box highlights the molecule. Three orange arrows point from the text 'Valinta- ja siirtotyökalut' to the selection and zoom tools. Another orange arrow points from 'Korjaustyökalu' to the pan tool. The molecule has a red 'HO' group at the top, a blue '+' sign to its right, and a green highlight covering the rest of the structure. The bottom left of the interface shows 'A+' and 'A-' buttons.

Valinta- ja siirtotyökalut

Korjaustyökalu

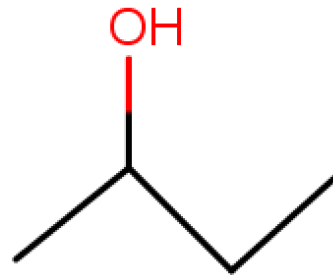




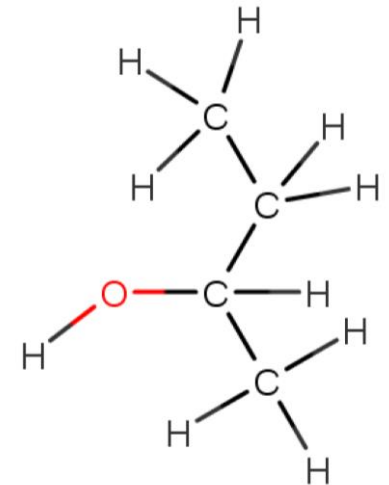
Joko viivakaava tai täydellinen rakennekaava?

Joko viivakaava tai täydellinen rakennekaava

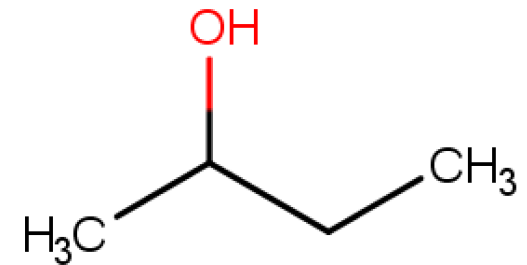
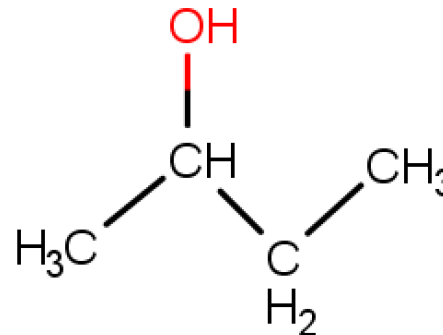
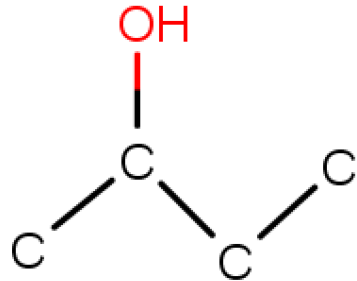
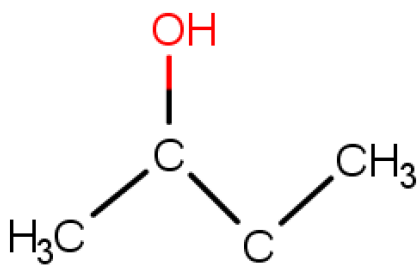
JOKO



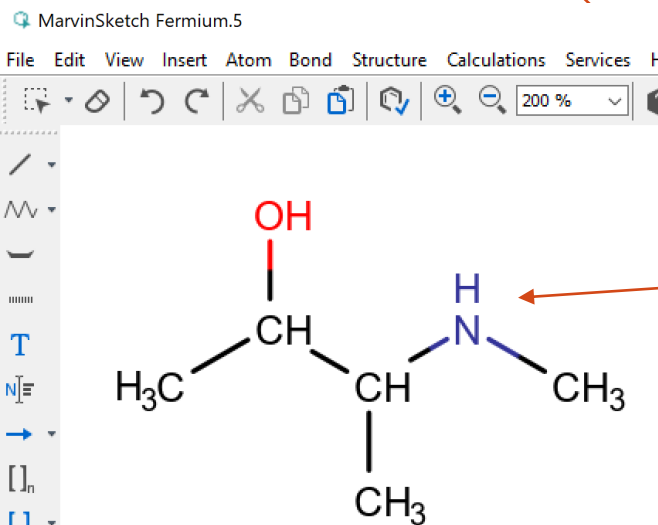
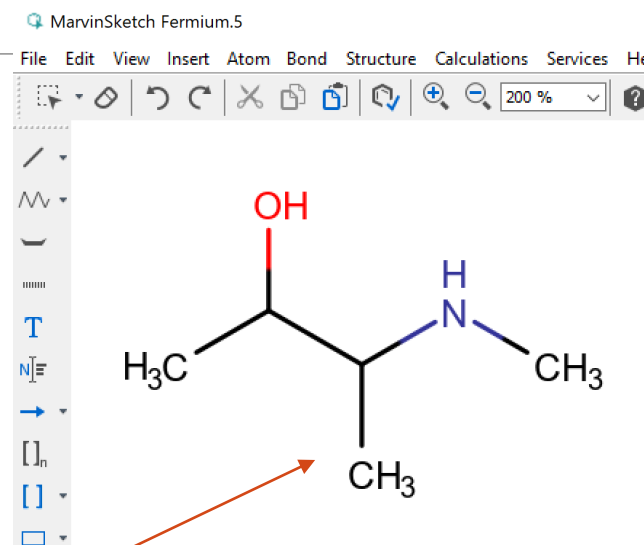
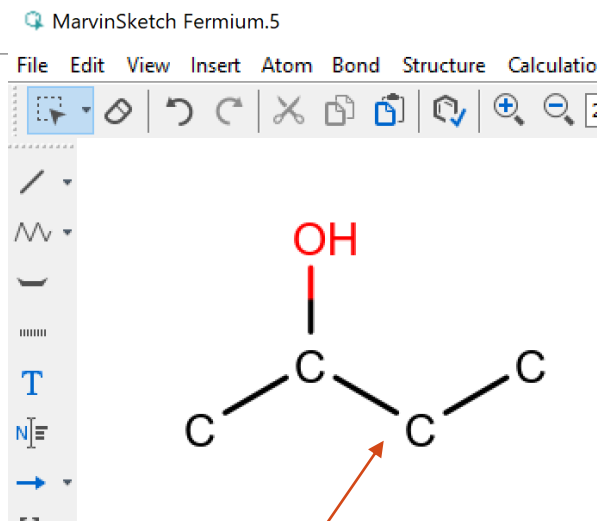
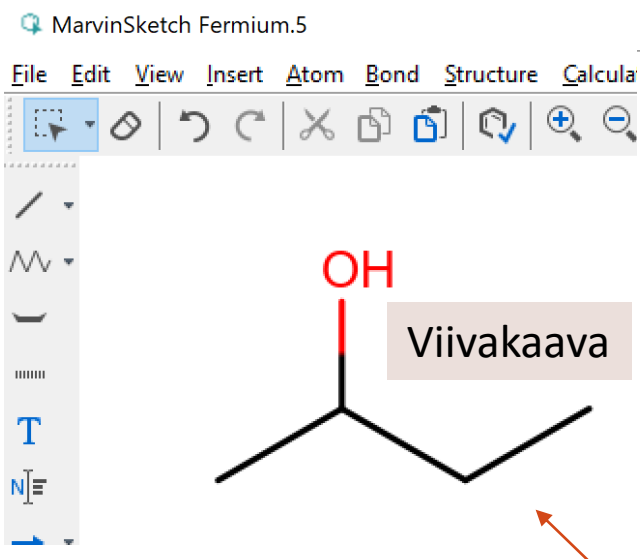
TAI



Eivät enää kelpaa yo-kokeessa



Hiiliatomien näyttäminen ja vedyt – viivakaava ja MUUT



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

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

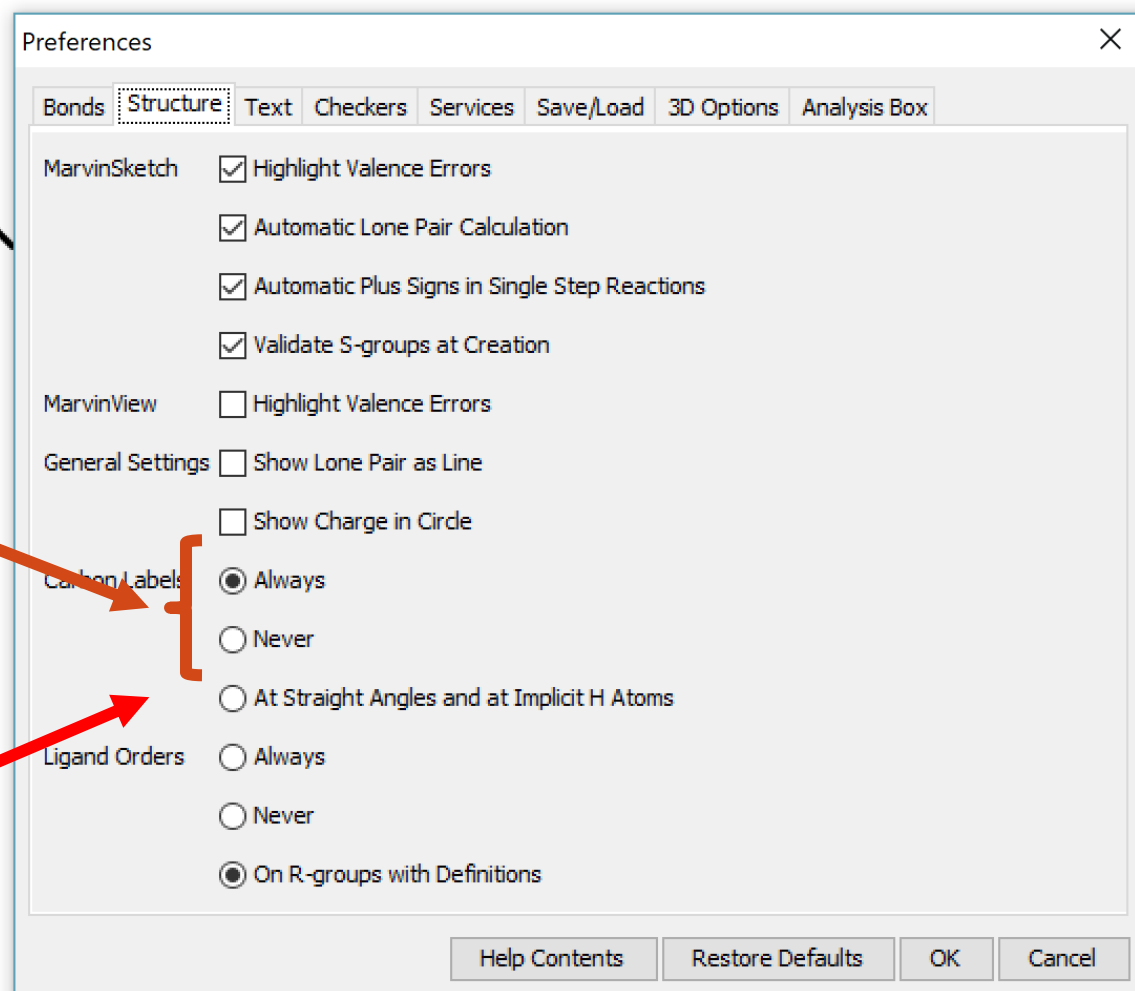
VAIHE 1: Hiilet näkeviin tai ei?



VAIHE1: Viivakaava tai täydellinen rakennekaava

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

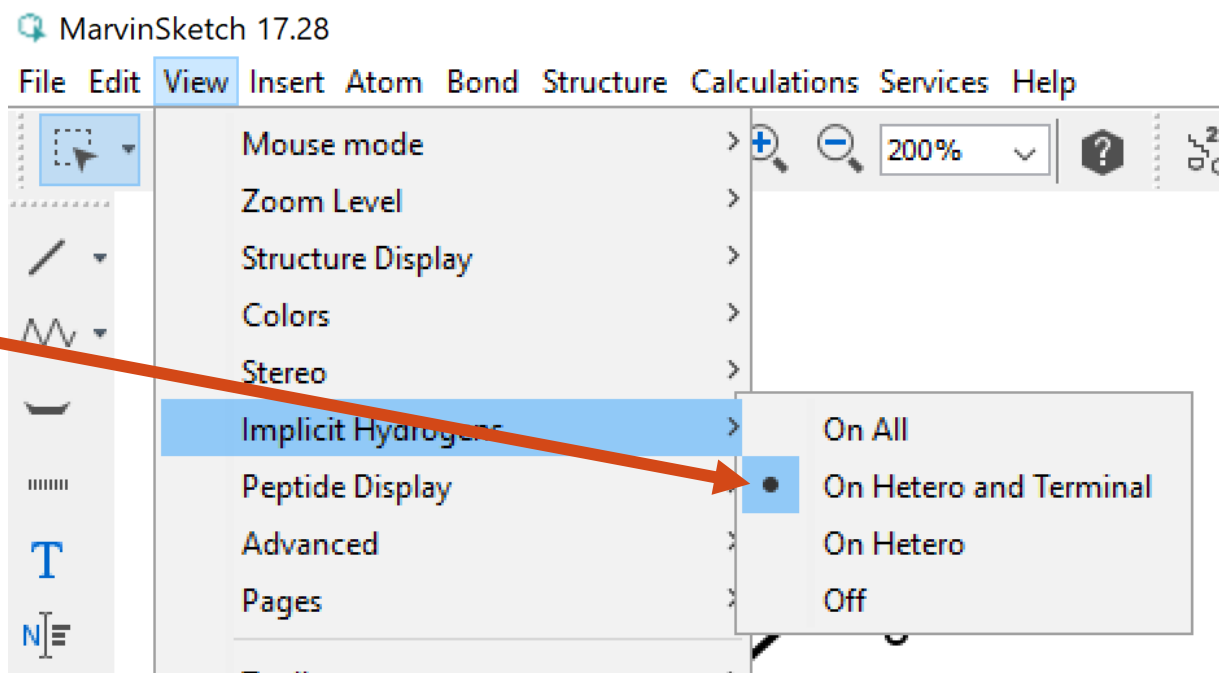
EI TÄTÄ



VAIHE 2: "Implisiittiset vedyt" pois



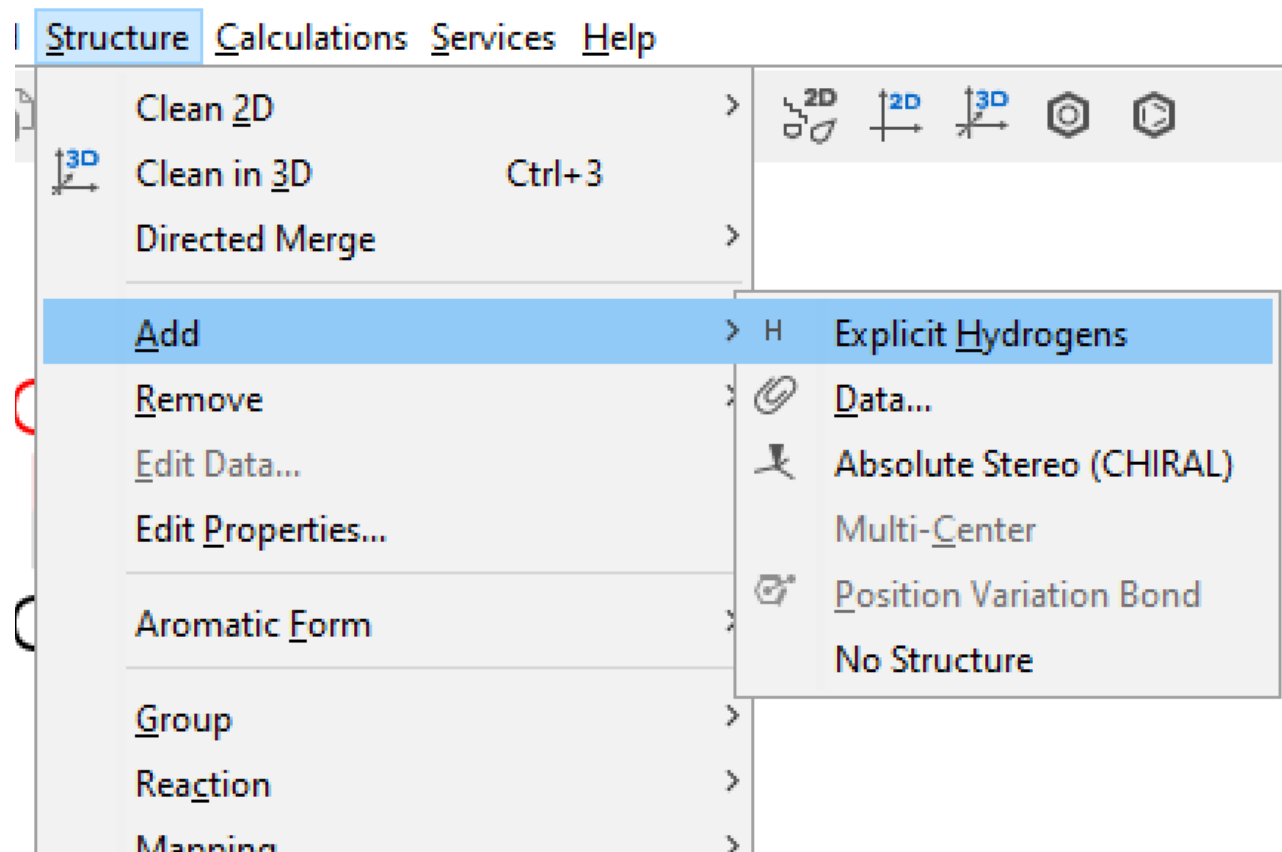
Varmistetaan
vetyjen
näkyminen **vain**
"heteroatomien"
yhteydessä
(funktionaalinen
ryhmä).



Vaihe 3: Jos täydellinen rakennekaava →



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

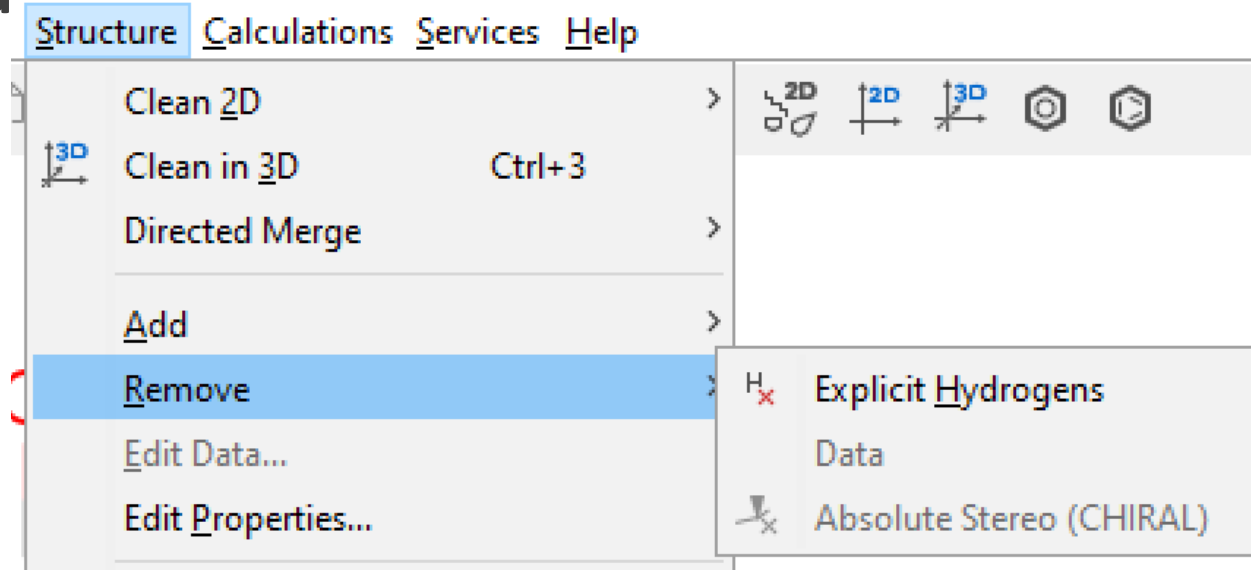


Paluu viivakaavaan?



Jos haluaa **palata viivakaavaesitysmuotoon.**

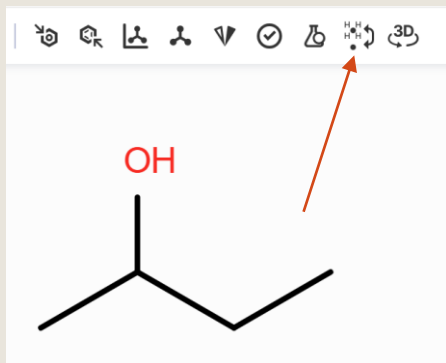
Poistetaan vedyt (viereinen kuva) ja poistetaan hiiliatomien merkinnät (Preferences – osiosta Carbon labels → Never)



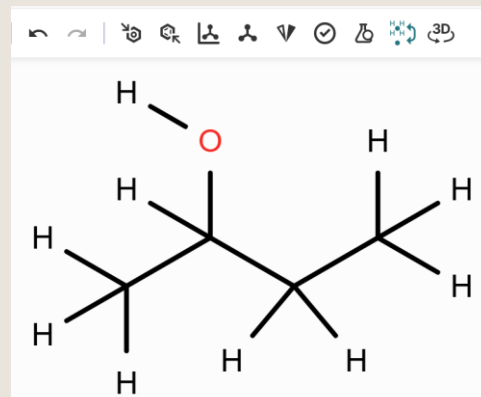
Ketcher - Viivakaava

VINKKI:

Piirrä perusviivakaava ensin hiiliatomeilla ja sitten korvaa oikeilla atomeilla ja korjaa sidokset. Ja sitten "cleanup".



Kaikki vedyt näkyviin tai pois
Vaatii myös hiiliatomien merkinnän



Hiiliatomien näyttäminen



Asetuksista valitaan:

- Hiiliatomit näkyviin (täyd. rakennekaava)
- Vedyt vain heteroatomeihin (viivakaavassa)

Vedyt **viivakaavassa** näkyviin vain heteroatomien yhteydessä.

Molekyylien siivoaminen

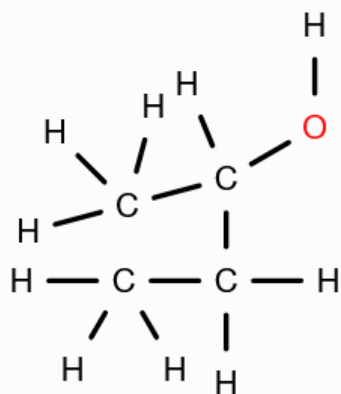


MarvinSketch

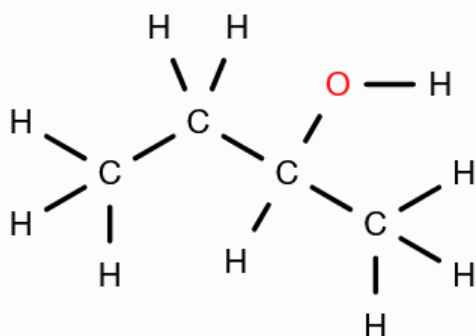
Structure Calculations Services Help

Clean 2D	>	Clean in 2D	Ctrl+2
Clean in 3D	Ctrl+3	Clean and Arrange in 2D	Ctrl+Shift+2
Directed Merge	>	Hydrogenize Chiral Center	

sekava piirros



korjattu piirros



Voit siistiä rakenteita ja kulmia valitsemalla ylhäältä **Layout**

MarvinSketchin ja Ketcherin perustoiminnot – lukion vaatimat



MarvinSketch

(mihin Ketcher ei pysty!)

- ▶ nimeäminen
- ▶ vapaat elektroniparit
- ▶ 3D-mallinnus
- ▶ asymmetrisen hiilen (kiraliakeskus) osoittaminen

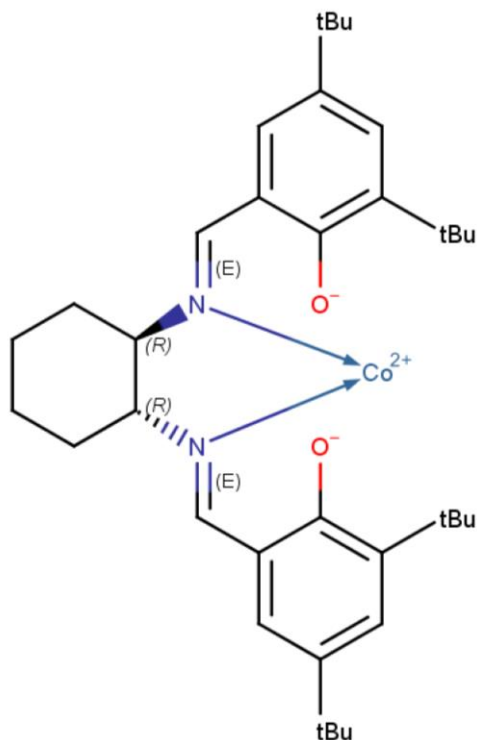
Ketcher

- ▶ viivakaava
- ▶ sidosviivakaava
- ▶ ionivaraukset kaavoihin
- ▶ E/Z ja R/S-isomeerit (huono esitysmuoto!!)
- ▶ polymeerin piirtäminen
- ▶ reaktioyhtälön laatiminen
- ▶ Ketcherin valmiit rakennekaavat (mallikirjasto)

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.

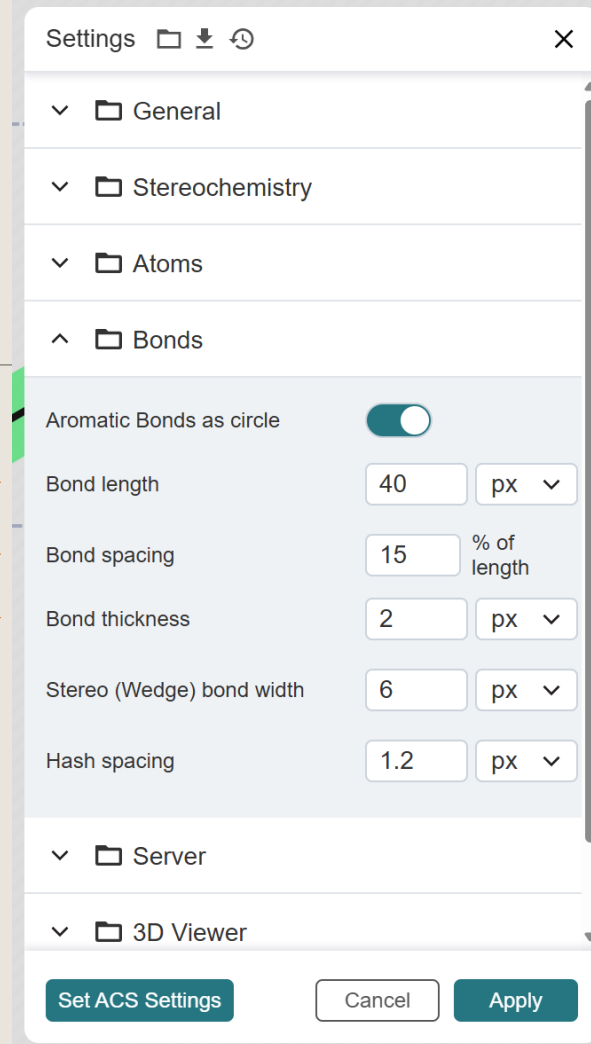
Single Atoms	Multicenter
<input checked="" type="radio"/> Arrow	<input checked="" type="radio"/> Hashed
<input type="radio"/> Solid	<input type="radio"/> Solid

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

Ketcher - Sidokset

Sidoksen ominaisuudet:

- Sidosviivan pituus
- Sidosviivan väli
- Sidosviivan paksuus

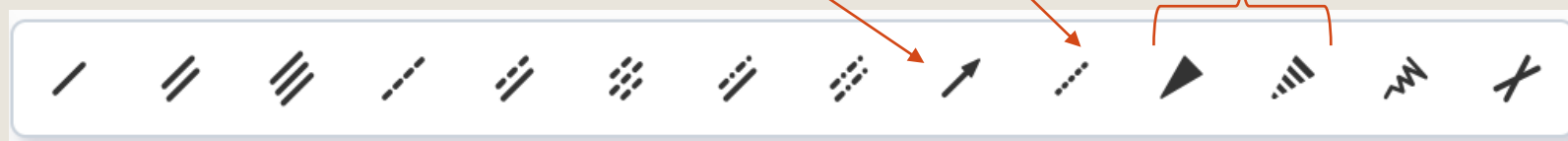


Kovalenttiset
sidokset

Koordinaatio-
sidoksen nuoli

Vetyidos

Single Up/Down



Vety- ja molekyylien välisten sidosten piirtäminen MarvinSketch ja Ketcher



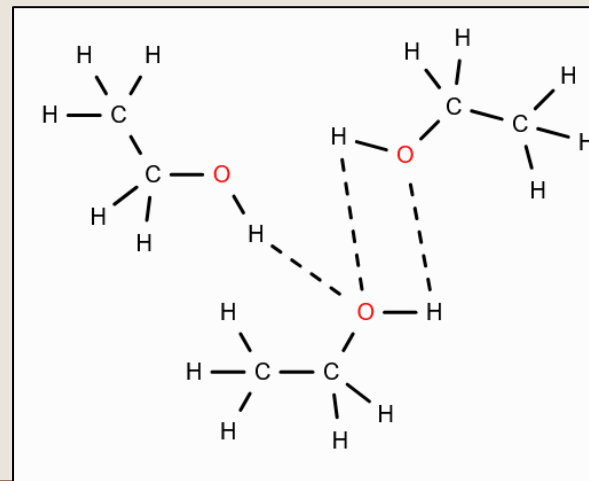
Sidosvalikosta valitaan Any ja piirretään molekyyliin

The screenshot shows the MarvinSketch software interface. The menu bar includes File, Edit, View, Insert, Atom, Bond, Structure, Calculations, Services, and Help. The Bond menu is open, showing options: Single, Double, Triple, Aromatic, Single Up, Single Down, Single Up or Down, Double Cis or Trans, Double C/T or Unspec, Single or Double, Single or Aromatic, Double or Aromatic, Any (highlighted), and Coordinate. To the right, a chemical structure of ethanol is shown with dashed lines representing hydrogen bonds between the hydroxyl group of one molecule and the hydroxyl group of another.

Valitse Sidosvalikosta sidostyyppi **any bond** ja piirrä sidos molekyylien välille

A close-up of the bond menu in MarvinSketch. The 'Any Bond (0)' option is highlighted with a red rounded rectangle.

Vetyidos (ja dipoli-dipoli-sidos) piirretään **katkoviivalla** Ketcherissä

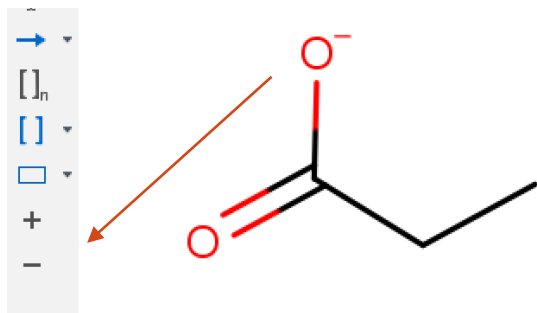


MarvinSketchin ja Ketcherin perustoiminnot – varaukset



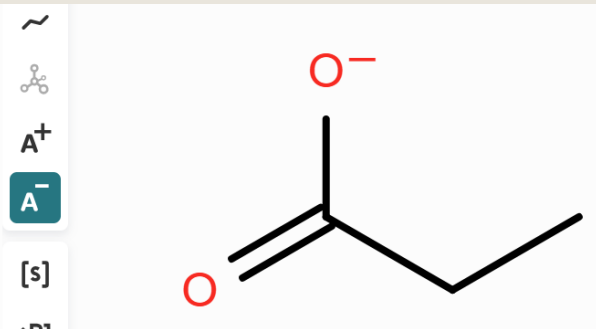
MarvinSketch

- Piirrä kaava haluamallasi tavalla.
- Lisää + tai – varaus atomille.
- Vetyjä (yleensä) lähtee pois tai tulee lisää automaattisesti.



Ketcher

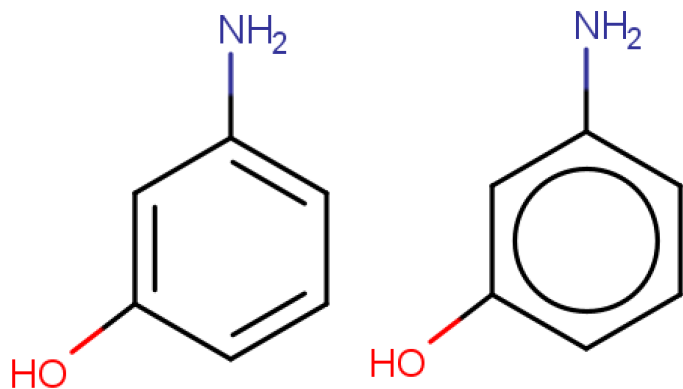
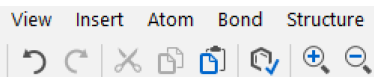
- Piirrä kaava haluamallasi tavalla.
- Lisää + tai – varaus atomille.
- Vetyjä (yleensä) lähtee pois tai tulee lisää automaattisesti.
- Yläpalkin eksplisiittisten vetyjen painikkeesta saat puuttuvia sidosviivoja näkyviin.



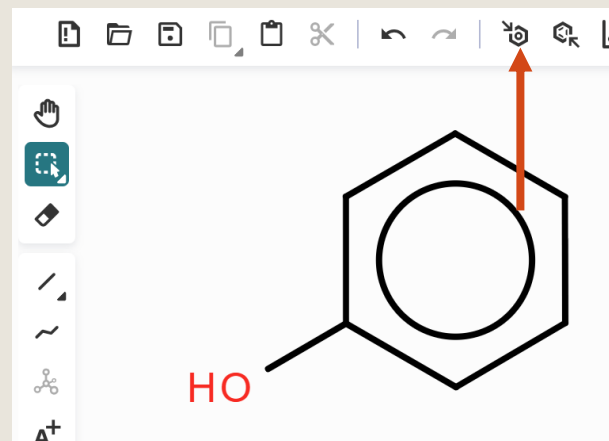
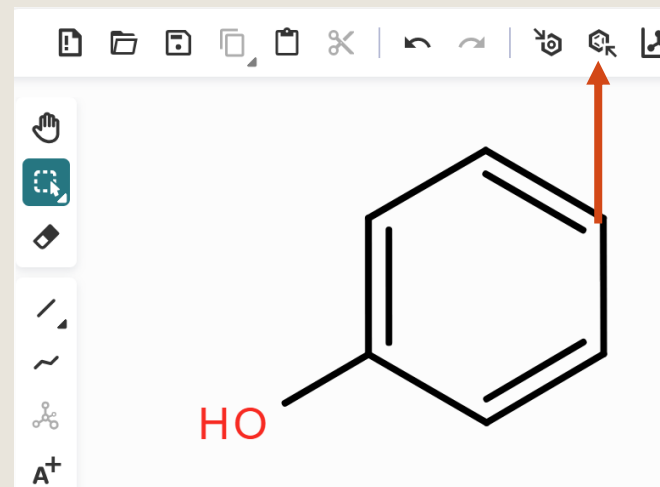
MarvinSketchin ja Ketcherin perustoiminnot – aromaattiset



MarvinSketch



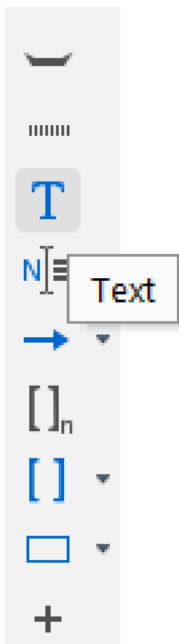
Ketcher



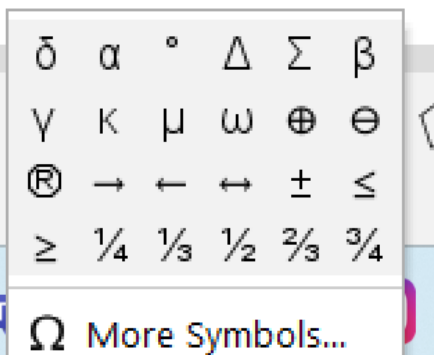
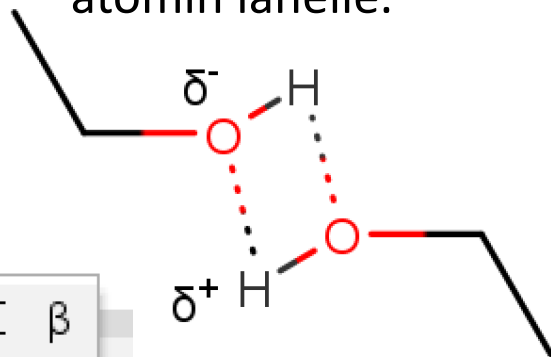
MarvinSketchin ja Ketcherin toiminnot – osittaisvaraukset



MarvinSketchillä ja Ketcherillä tuotetaan osittaisvaraukset tekstieditorilla. MarvinSketch: **Text**. Ketcher: Valitse **Add Text**

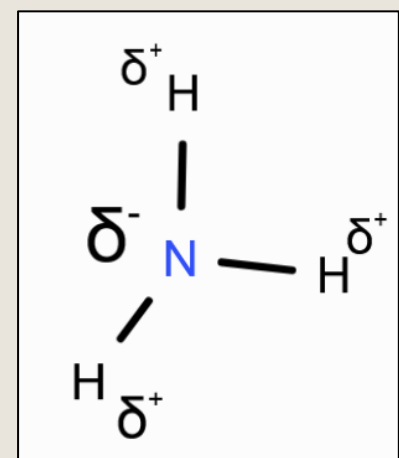


Siirrä teksti atomin lähelle.



Positiivinen osittaisvaraus merkitään δ^+

Siirrä teksti atomin lähelle.

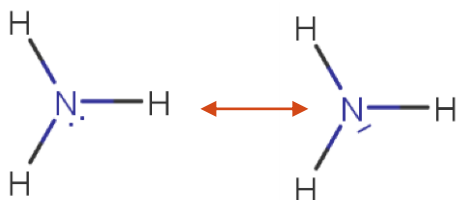


MarvinSketchin ja Ketcherin perustoiminnot – vapaat elektroniparit



MarvinSketch

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



Marvin-Sketch

General Settings Show Lone Pair as Line
 Show Charge in Circle
Carbon Labels Always
 Never
 At Straight Angles and at Implicit H Atoms

Ketcher

Ketcher **ei tuota** automaattisesti. Vapaat elektroniparit täytyy tuottaa tekstieditorilla pisteellä tai kaksoispisteellä. **Sidoskulmat täytyy korjata käsin.**

View Insert Atom Bond Structure Calculations Services Help
Mouse mode 200%
Zoom Level
Structure Display
Colors
Stereo
Implicit Hydrogens
Peptide Display
Advanced
Pages
Toolbars
 Menubar F11
 Status Bar
Grid Shift+F9
Guidelines Ctrl+Shift+F9
Atom Numbering
Atom Properties
Atom Mapping
Bond Lengths
Lone Pairs
R-groups
R-Logic

Vapaat elektroniparit



View Inset Atom Bond Structure Calculations Services Help

Mouse mode > [Zoom] 200%

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

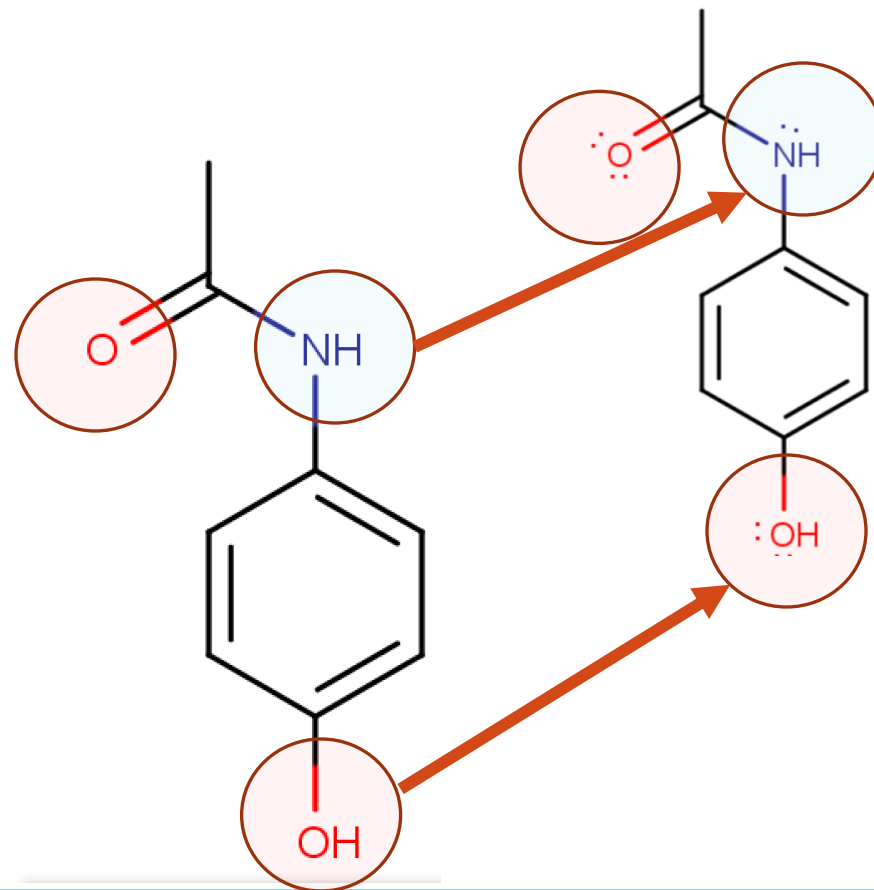
✓ Ligand Error

✓ 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

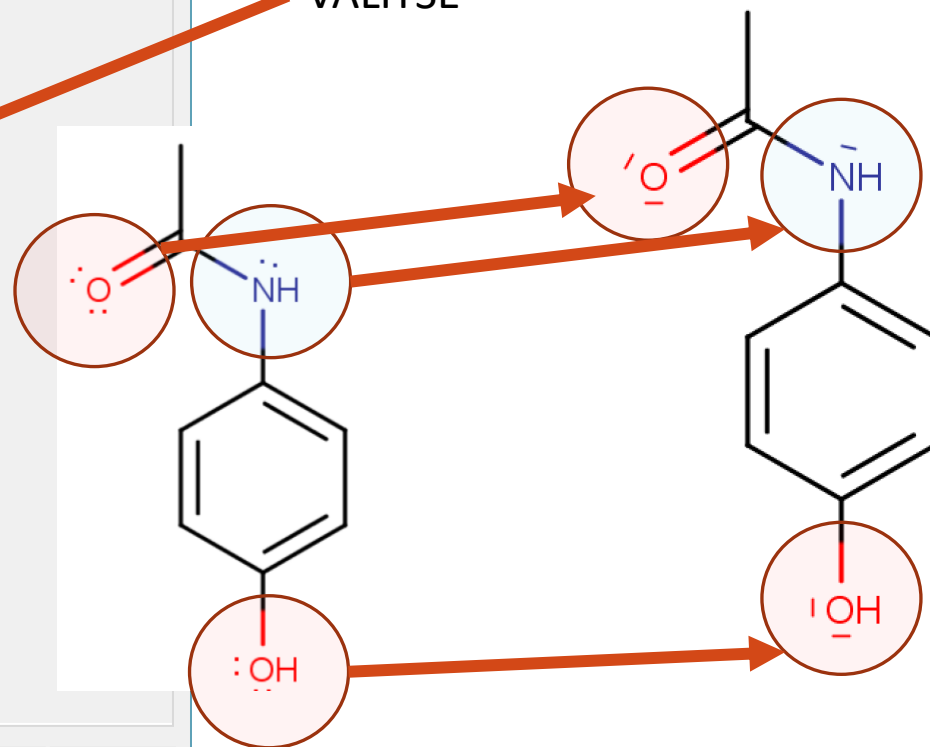
General Settings Show Lone Pair as Line
 Show Charge in Circle

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

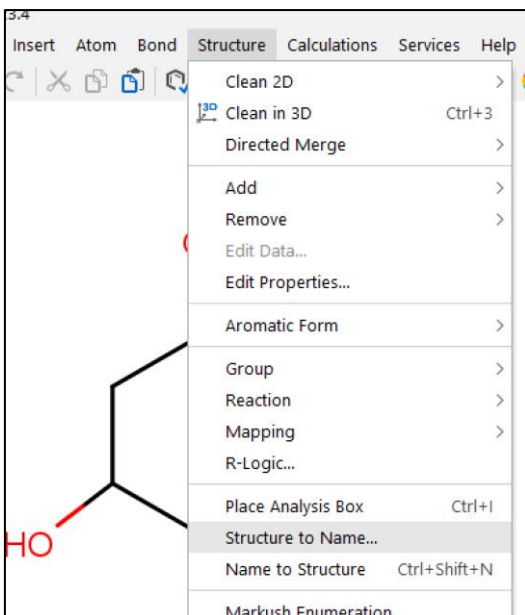
Ligand Orders Always
 Never
 On R-groups with Definitions

Help Contents Restore Defaults OK Cancel

VALITSE



Molekyylin nimeäminen



Naming Options

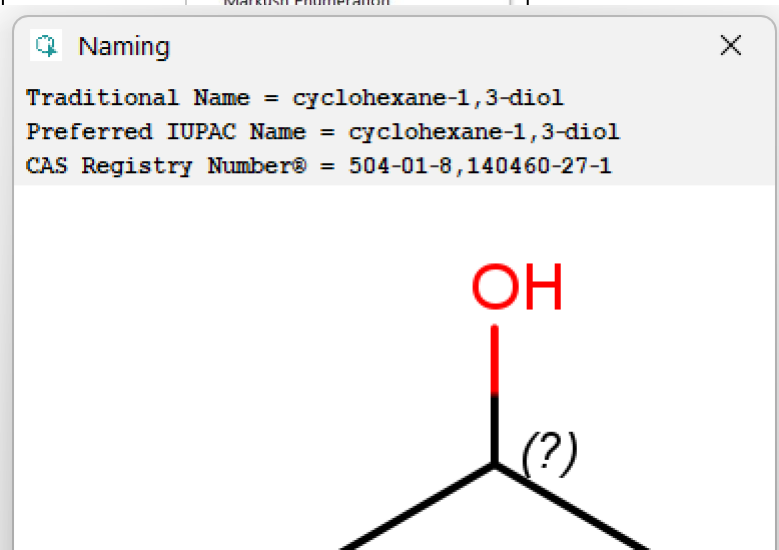
Generate Preferred IUPAC Name
 Generate Traditional Name
 Retrieve CAS Registry Number®

Single fragment mode

OK Cancel Restore Defaults

Nimeäminen onnistuu MarvinSketch –ohjelmalla, **EI Ketcherillä**

Tällä merkittävä vaikutus kemian opetukseen?
Palaako nimeämistehtävät ylioppilaskokeeseen?
Käytetäänkö taas oppitunti nimeämisen opiskeluun?



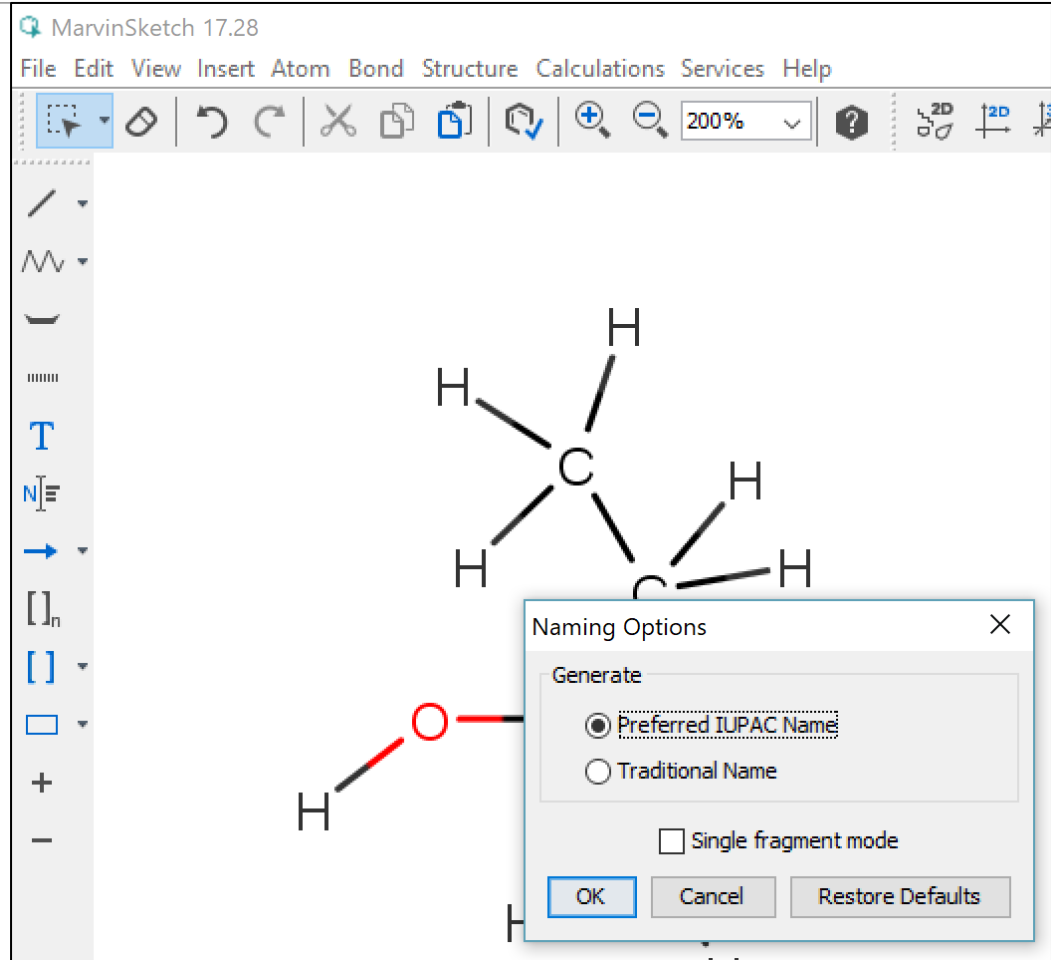
MarvinSketch ja Ketcher –ohjelmilla on mallikirjastot (Templates)

MarvinSketch nimeää molekyyliä



Miten kurssilla
opetetaan orgaanisten
molekyylien
nimeäminen? Miksi?

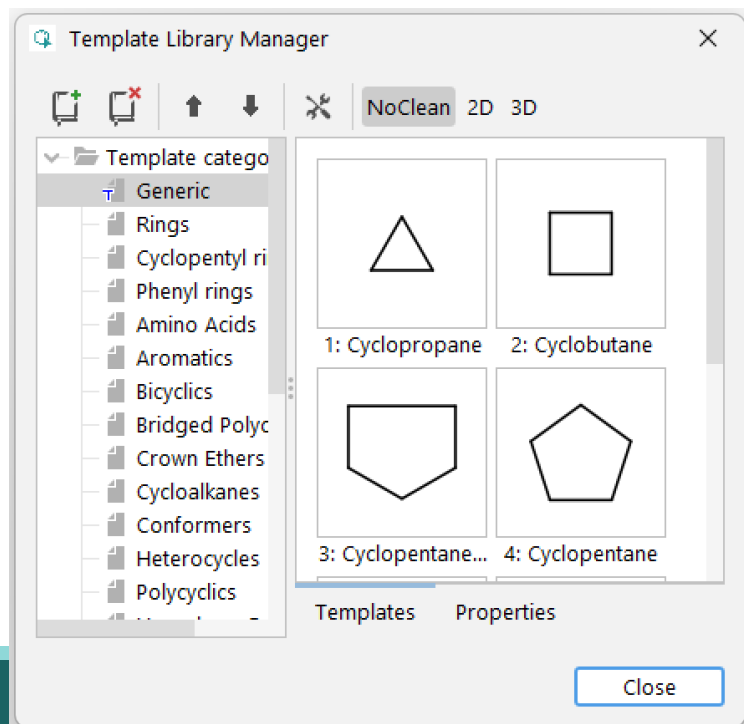
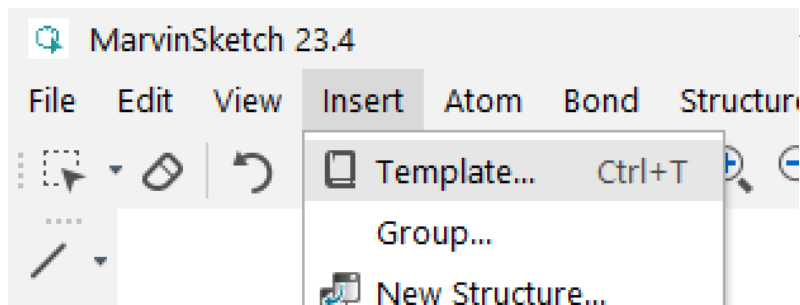
MarvinSketch tuottaa
nimet ja toisinpäin –
nimestä rakenteen.



Molekyylien mallikirjastot

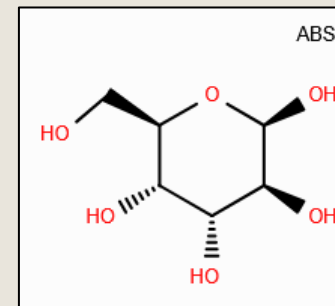
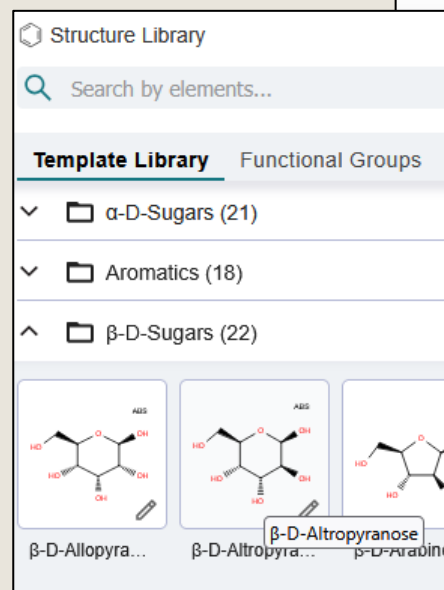


MarvinSketch



Ketcher

Valitse alhaalta
Structure Library → Template library

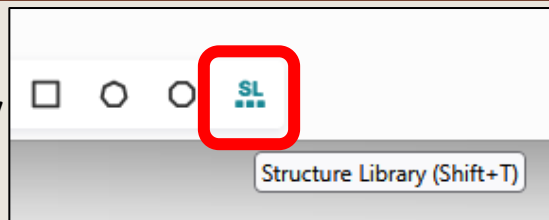


Molekyyliin, funktionaalisten ryhmien ja liuottimien kirjastot



Valitse alhaalta

Structure Library → Template library



Structure Library

Search by elements...

Template Library Functional Groups

- α-D-Sugars (21)
- Aromatics (18)
- β-D-Sugars (22)

β-D-Allopyra... β-D-Altropyra... β-D-Arabinof

Structure Library

Search by elements...

Template Library **Functional Groups** Salt

 CF3	 CN	 CO2Et
 CO2Me	 CONH2	 CO2Pr

Structure Library

Search by elements...

Template Library Functional Groups **Salts and Solvents**

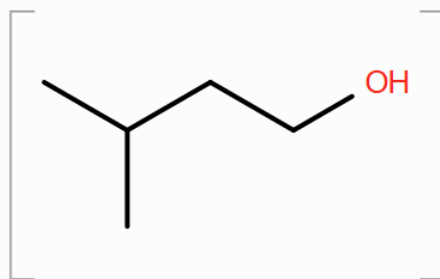
 acetic acid	 acetic anhydr...	 formic acid	 methane sul...
 propionic acid	 1,2-propanediol	 1,3-propanediol	 1,4-butanediol

Templates – Salt and solvents



Oletuksena on, että työpöydälle tulee aluksi yhdisteen nimi (vihreällä pohjalla ja pöydälle tulee nimi). Molekyylin kuva näkyy hetken.

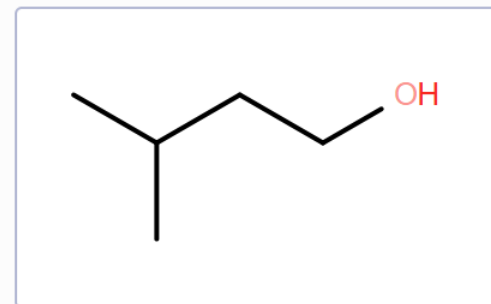
Molekyylin saa piirrettyä valitsemalla joko Expand Abbreviation / Remove ... (jälkimmäinen poistaa kuvansta nimen).



isoamyl alcohol

isoamyl alcohol

isoamyl alcohol

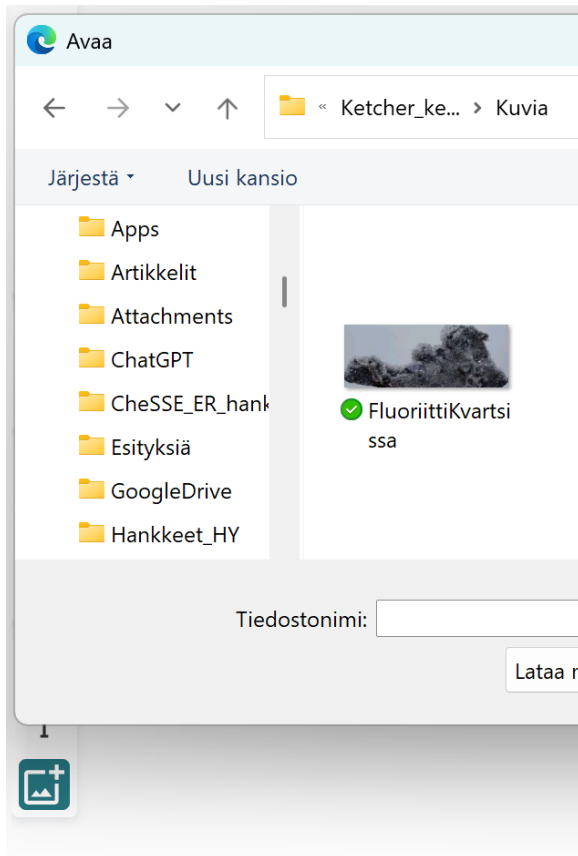


isoamyl alcohol

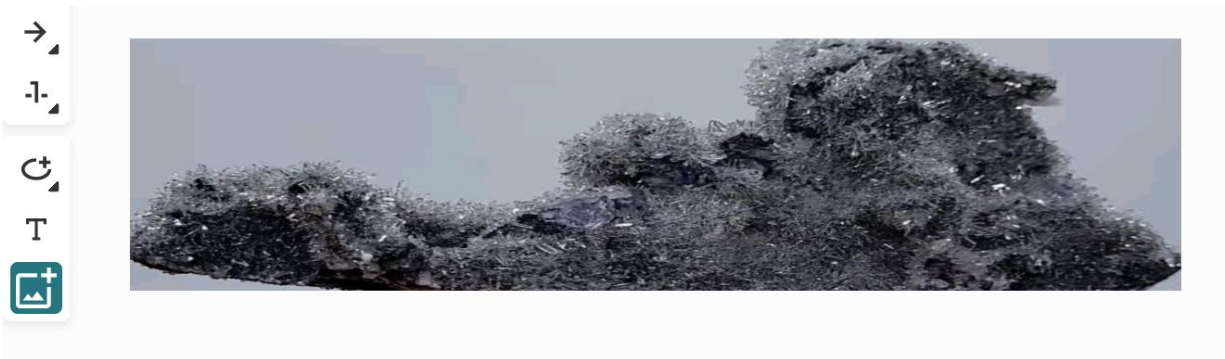
Expand Abbreviation

Remove Abbreviation

Ketcher – kuvien lisääminen työpöydälle



Kuvien lisääminen on mahdollista Ketcherissä (MarvinSketchissä ei tätä mahdollisuutta ole).

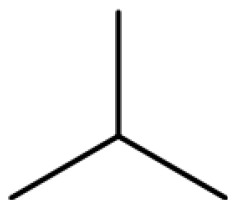
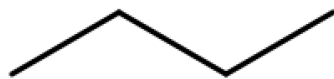


Isomerian opetus



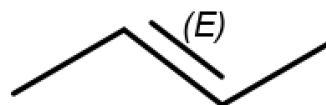
Hiilivedyt - funktionaaliset ryhmät: kaksoissidos, kolmoissidos, bentseenirengas

ALKAANIT



runkoisomeerejä

ALKEENIT



trans eli E

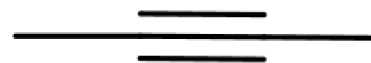


cis eli Z (Z)

cis-trans-isomeria

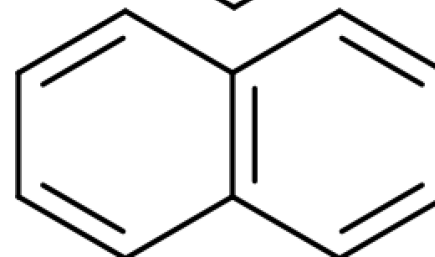
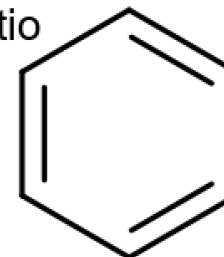
E/Z-isomeria

ALKYNYNI



sp-hybridisaatio

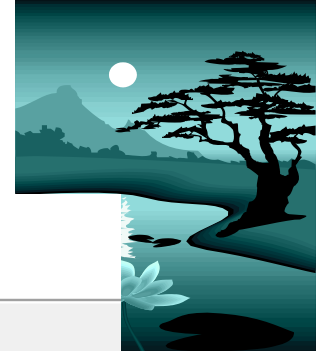
sp²-hybridisaatio



konformaatioisomeria (stereoisomeriaa):

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

E/Z-isomeriaa (MarvinSketch)



MarvinSketch Fermium.5

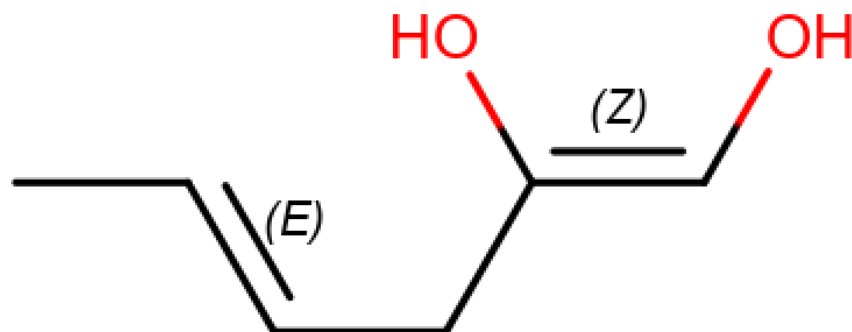
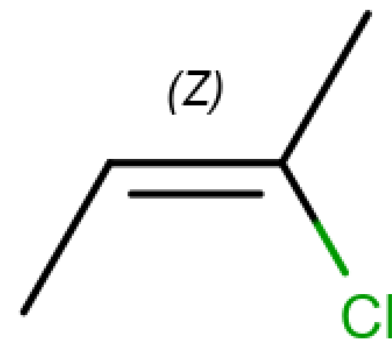
File Edit View Insert Atom Bond Structure Calculations Services Help

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)



MarvinSketch 19.2

File Edit View Insert Atom Bond Structure Calculations Services Help

The screenshot shows the 'View' menu with the 'Stereo' option selected. The 'Stereo' 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-Buteeni.mrv - MarvinSketch 19.2

File Edit View Insert Atom Bond Structure Calculations Services Help

The screenshot shows the MarvinSketch 19.2 interface with the chemical structure of 2-buten-1-ol. The structure is shown in a skeletal representation. The E and Z labels are placed below the structure to indicate the configuration of the double bond. The E label is on the left, and the Z label is on the right.

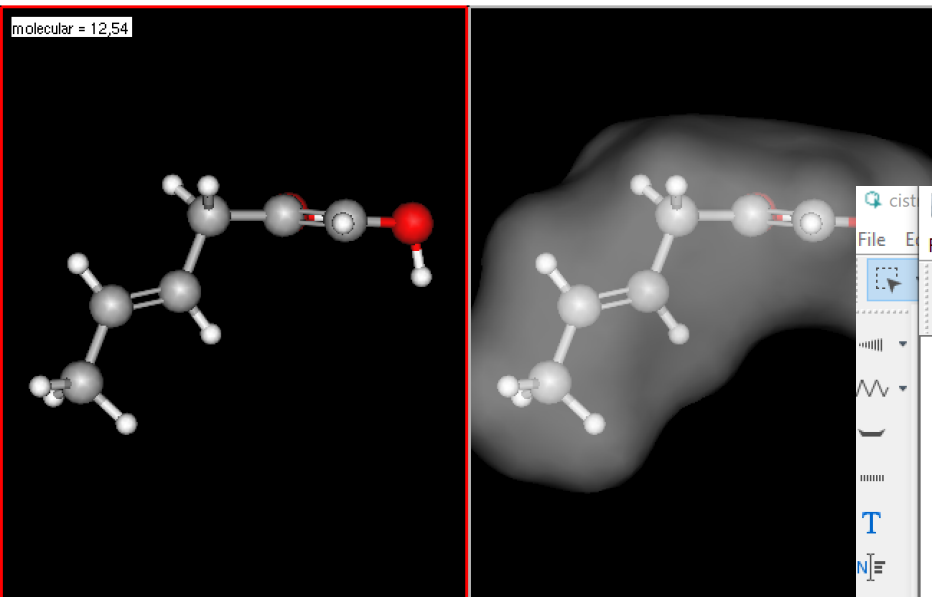
cis-trans- /E/Z-isomeria ja 3D (MS)



cistrans_isomeriaa.mrv - MarvinSketch Fermium.5

Polarizability

molecular = 12,54



Polarizability Options

Decimal places 2

Type

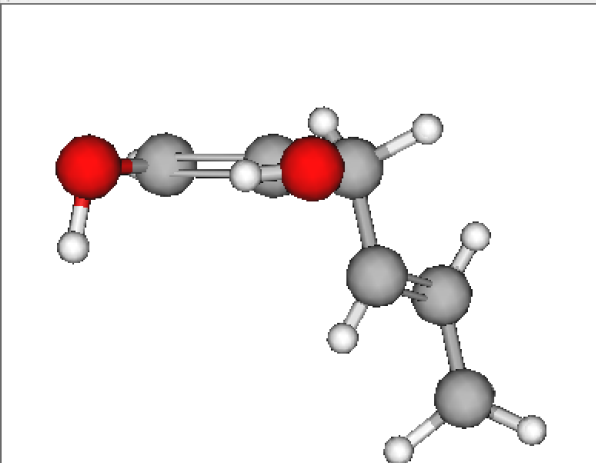
Molecular

Atomic

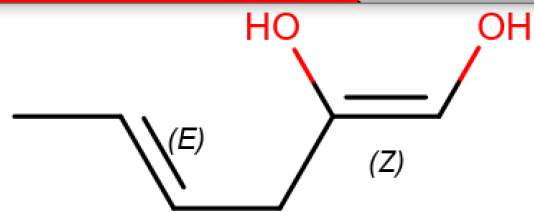
MarvinSpace

File Edit Display Show Animation Layout Alignment Help

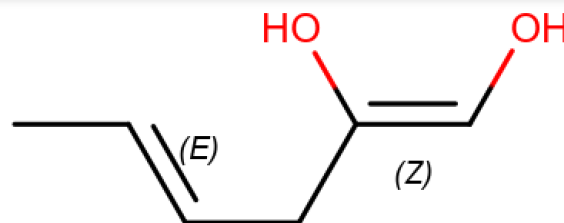
1Å 60° -15°



Fermium-versiolla tehty 3D



Uudemalla MarvinSketch-ohjelmalla tehty 3D



Peilikuvaisomeria ja piirtäminen (MS)



MarvinSketch Fermium.5

File Edit View Insert Atom Bond Structure Calculations Services Help

Mouse Mode > [Zoom: 200%]

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

Atomi tai atomiryhmä on tasosta ylöspäin tai alaspäin

Isomerian opetus? (MS)

MarvinSketch-ohjelma antaa sekä peilikuva- (R/S) 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

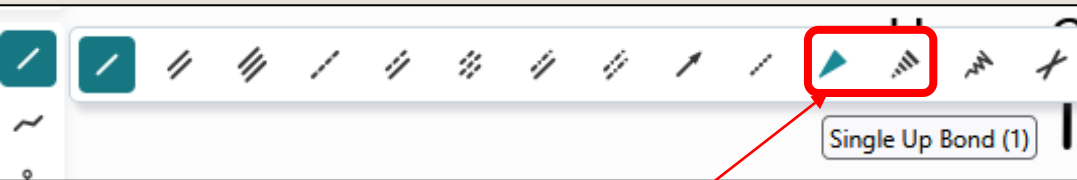
1 2

3 4

Select

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

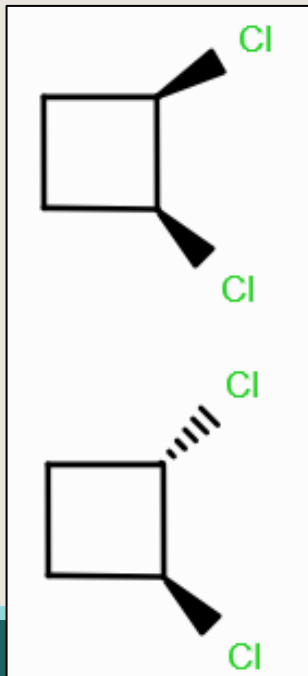
Cis-trans- ja E/Z-isomerian opetus Ketcherillä



Valitse oikea sidos sidosvalikosta

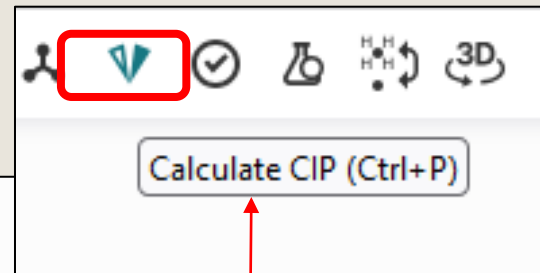
Sykliselle molekyylille
Cis-trans-isomeria:

Cis-
muoto

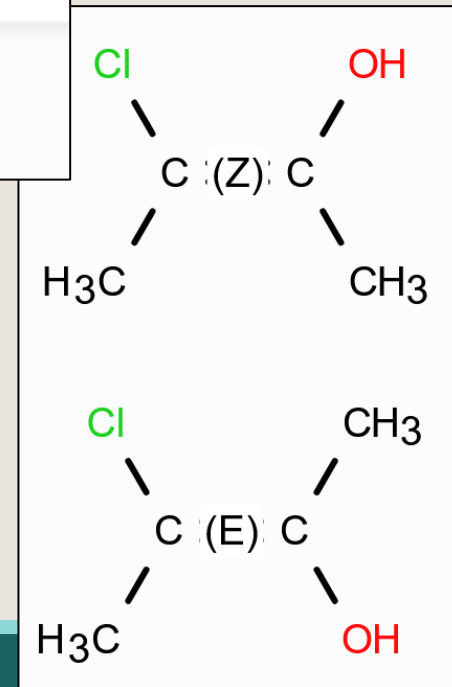
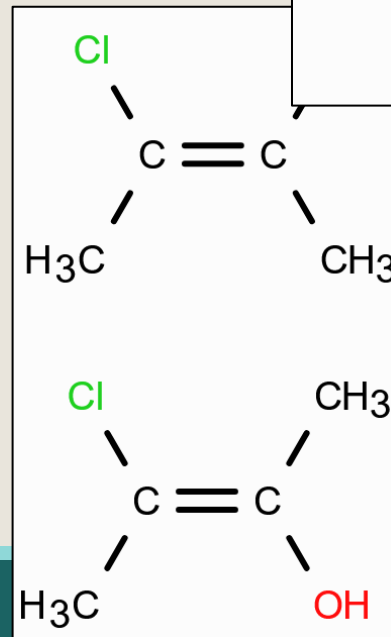


Trans-
muoto

E/Z-isomeria



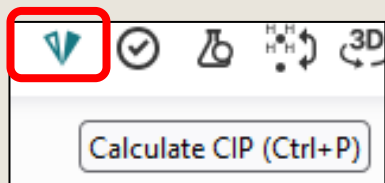
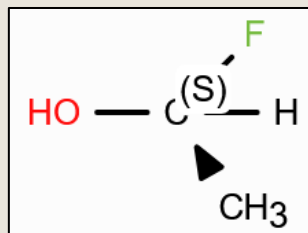
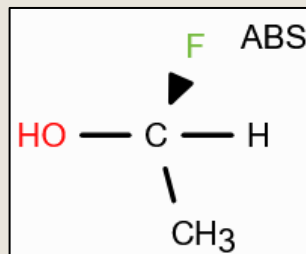
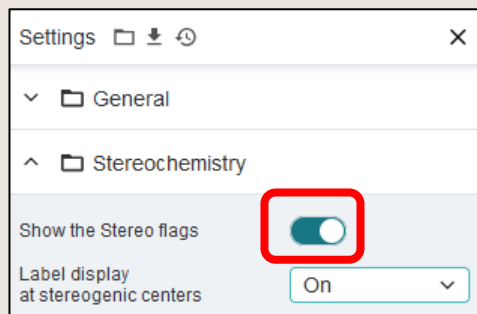
Valitse
ylävalikosta
Calculate
CIP



Peilikuvaisomeria (R/S) Ketcherillä

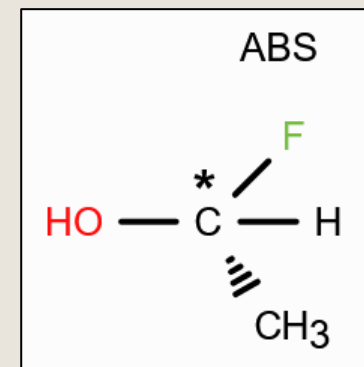


Vasta kun yksi sidoksista on piirretty **Poispäin** tai **Sinuun päin**, ilmestyy ABS teksti, joka kertoo että stereoisomeeri löytyy kun seuraava asetus on tehty: **Stereochemistry → Show the Stereo flags**

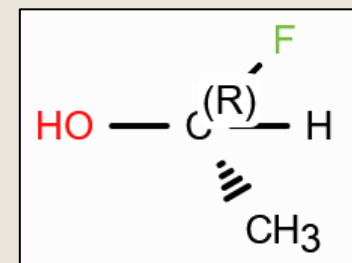


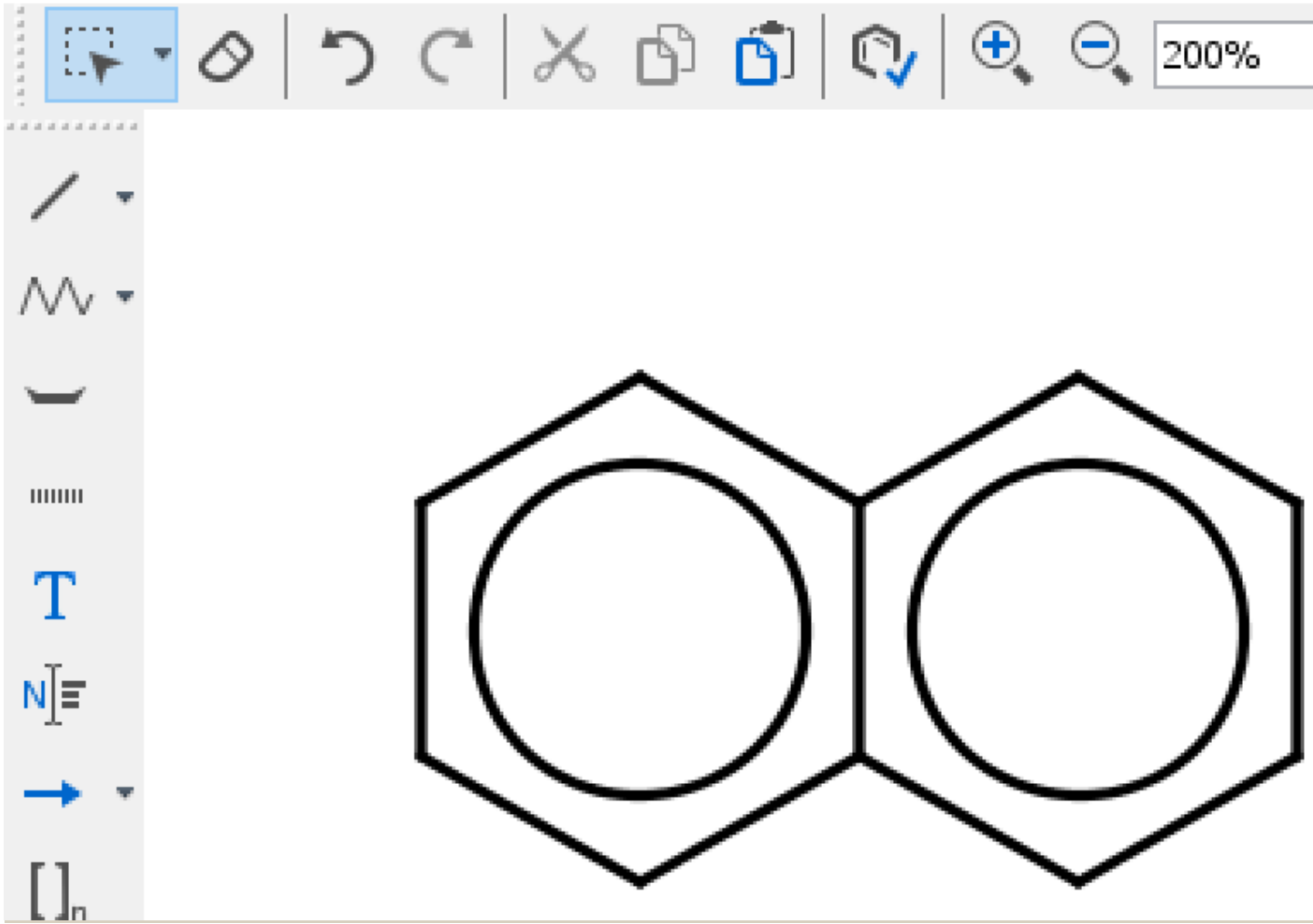
Ylhäältä **Calculate CIP** näyttää kaikki kiraliakeskukset (jos suunnallinen sidos on piirretty hiileen)

Voit merkitä kiraliakeskuksen tähdellä *
Käyttäen Tekstityökalua



Optisen isomeerin saat kun vaihdat sidoksien suuntia. Muista painaa uudelleen **Calculate CIP** →



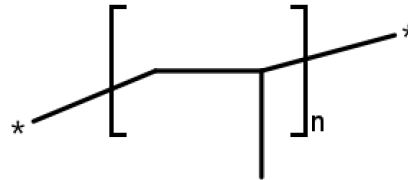
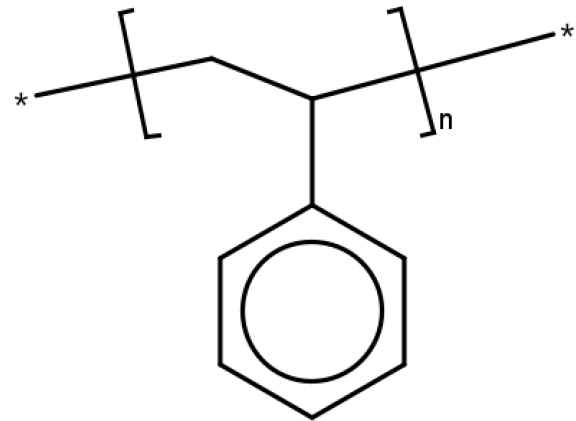


Erilaiset yhdisteet

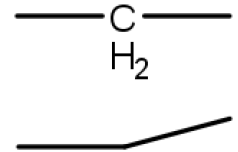
Polymeerit



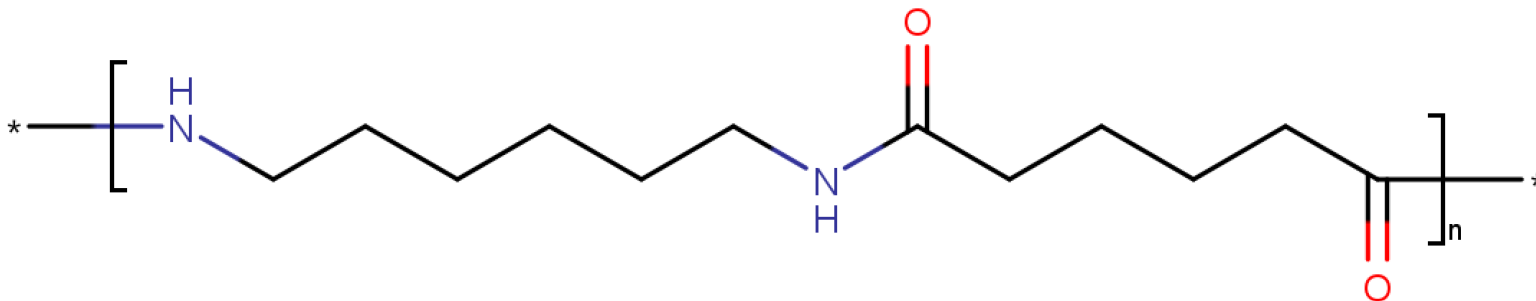
ADDITIOPOLYMEEREJÄ



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

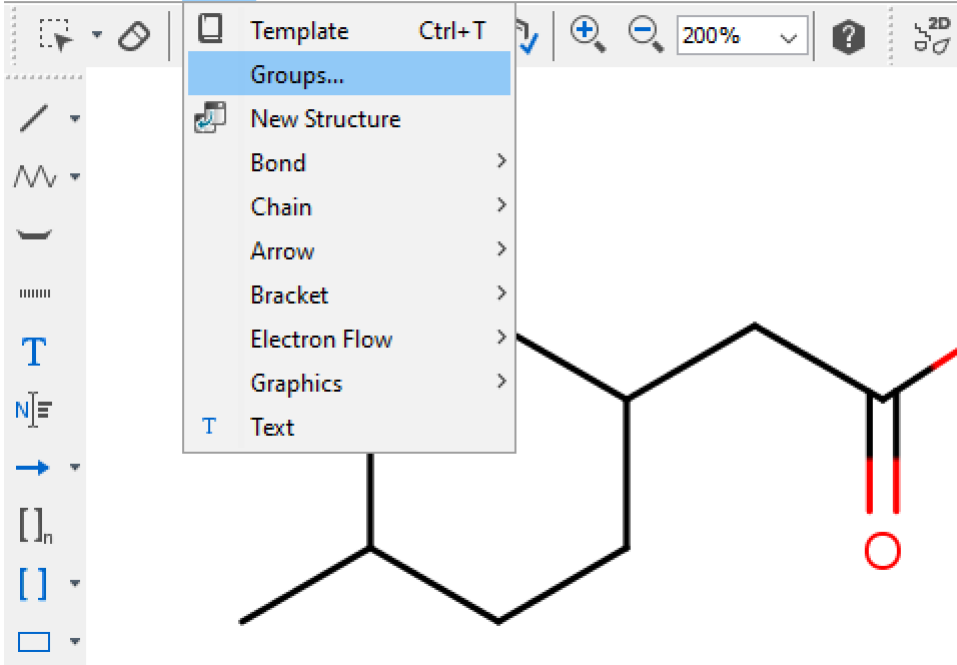


Orgaaniset suolat



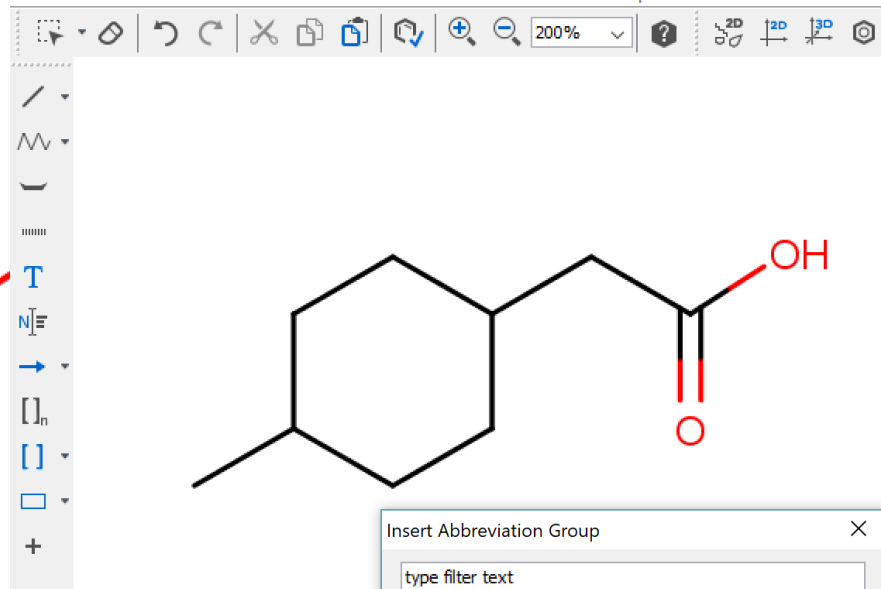
MarvinSketch 17.28

File Edit View Insert Atom Bond Structure Calculations Services Help



MarvinSketch 17.28

File Edit View Insert Atom Bond Structure Calculations Services Help



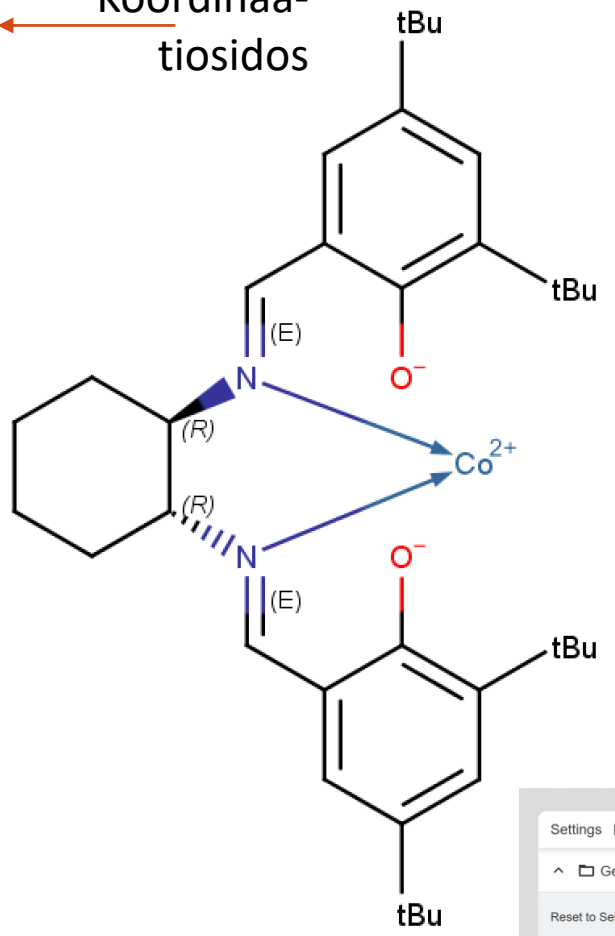


Kompleksiyhdiste



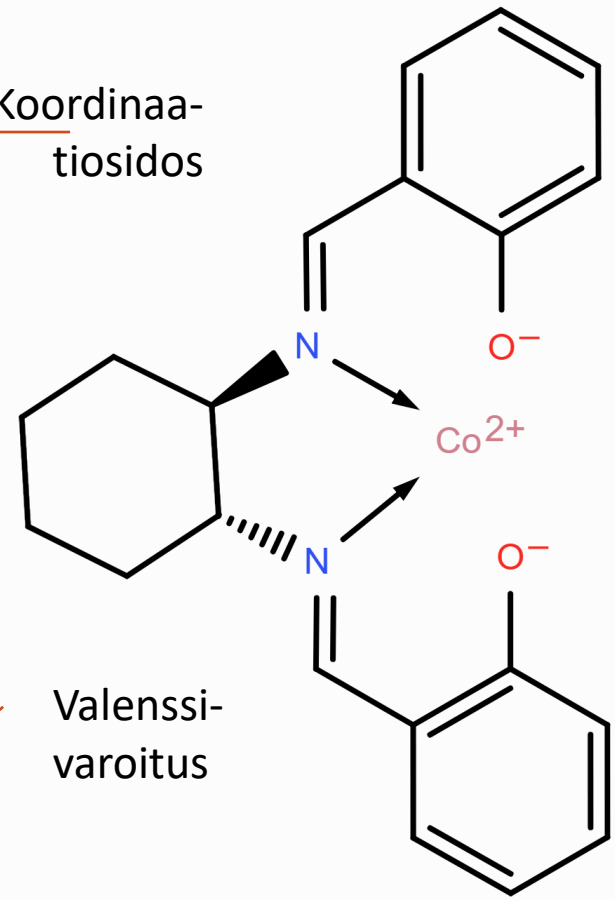
Ketcher

Koordinaa-
tiosidos



MarvinSketch

Koordinaa-
tiosidos



Valenssi-
varoitus

Settings

- General
 - Reset to Select Tool: After Paste
 - Rotation Step, °: 15
 - Show valence warnings:
 - Atom coloring:
 - Font: Arial
 - Font size: 13 px
 - Sub font size: 13 px
- Stereochemistry
- Atoms
- Bonds

Co²⁺

Valikot – Calculations / Calculated Values

Mm. molekyylikaava, moolimassa



Calculations Services Help

Elemental Analysis

Protonation

Partitioning

Solubility

Charge

NMR

Isomers

Conformation

Geometry

Other

MarvinSketch

Ketcher

Elemental Analysis Options

Type

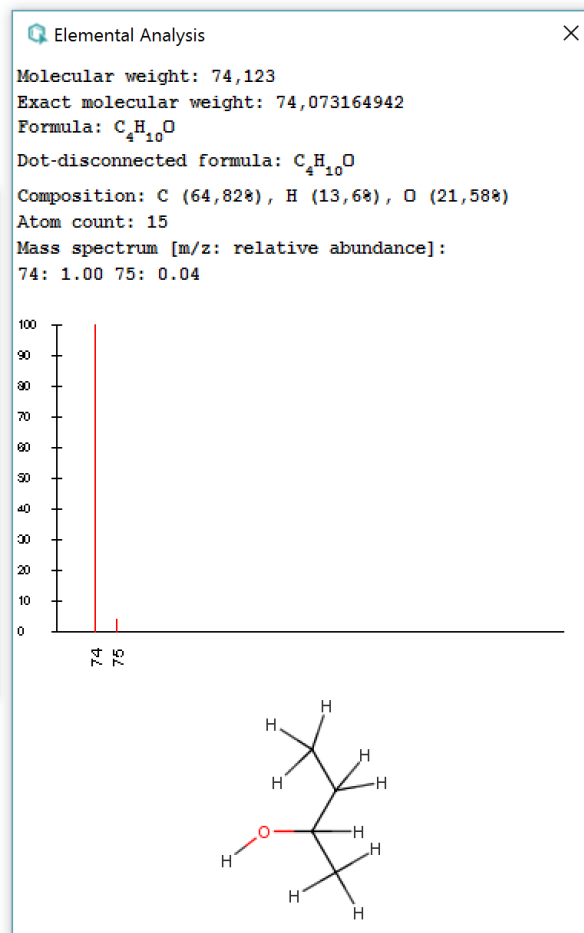
- Molecular weight
- Exact molecular weight
- Formula
- Dot-disconnected formula
- Mass spectrum
- Composition
- Atom count

Recognize formula in pseudo labels

Use D / T symbols for Deuterium / Tritium

Single fragment mode

OK Cancel Restore Defaults



Calculated Values

Chemical Formula:
 $C_{22}H_{28}N_2O_2; Co$

Molecular Weight: 352.470; 58.933
Decimal places: 3

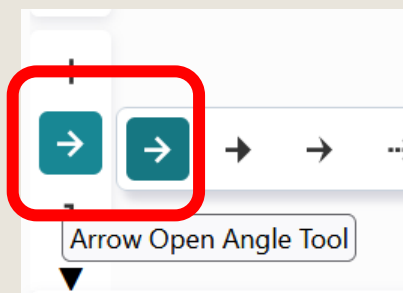
Exact Mass: 352.215; 58.933
Decimal places: 3

Elemental Analysis:
 $C 75.0 H 8.0 N 8.0 O 9.1; Co 100.0$

Close

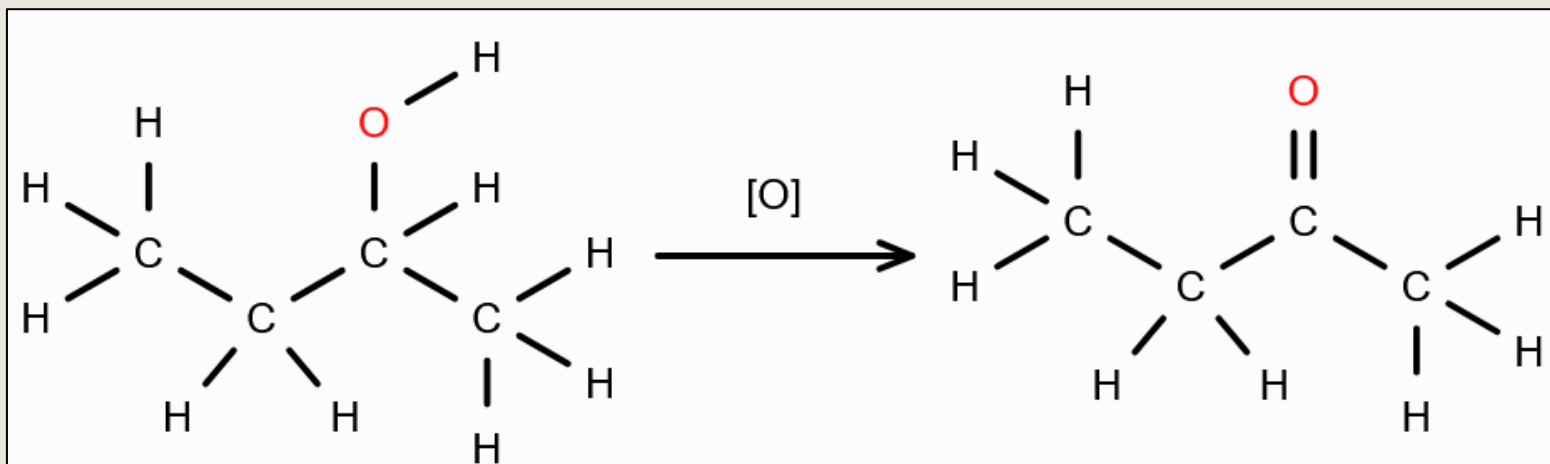
Kemialliset reaktiot

Reaktioyhtälöt -reaktionuolet

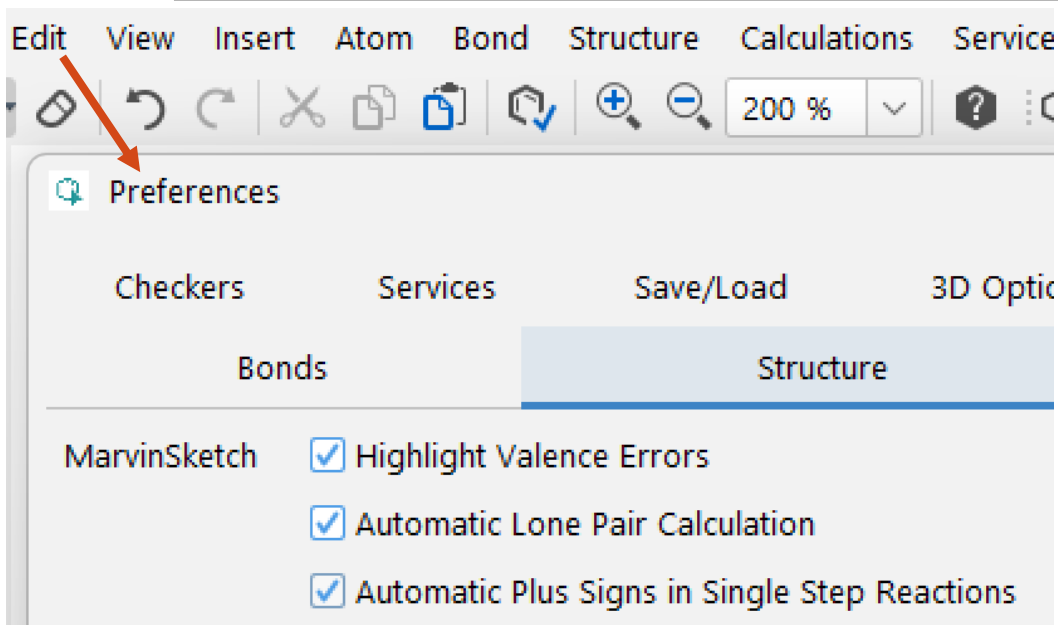


Piirrä lähtöaineet ja tuotteet. Valitse reaktionuoli vasemmalta: **Arrow Open Angle Tool**

Lisää teksti **[O]** reaktionuolen yläpuolelle



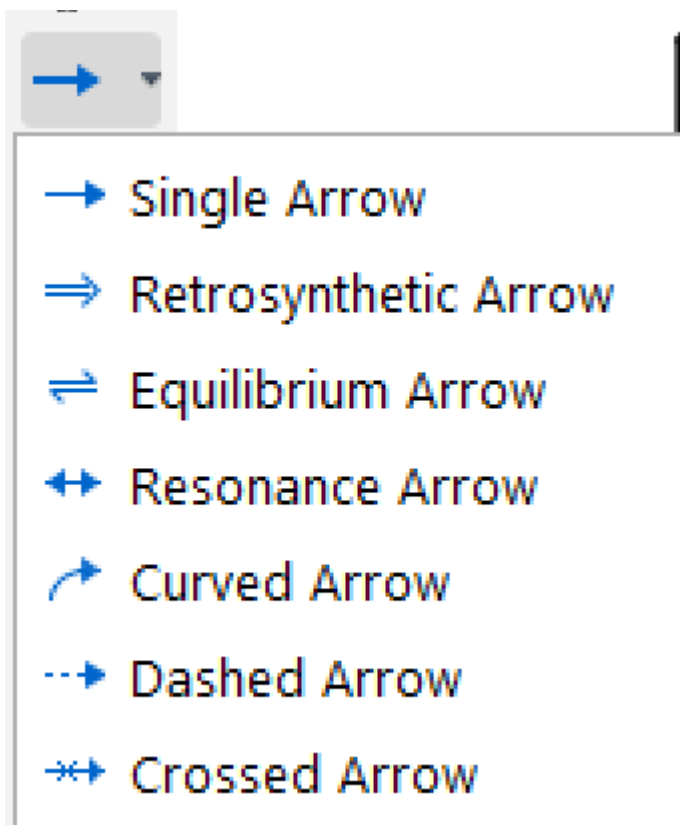
Reaktioyhtälöt ja reaktionuolet MarvinSketchilla



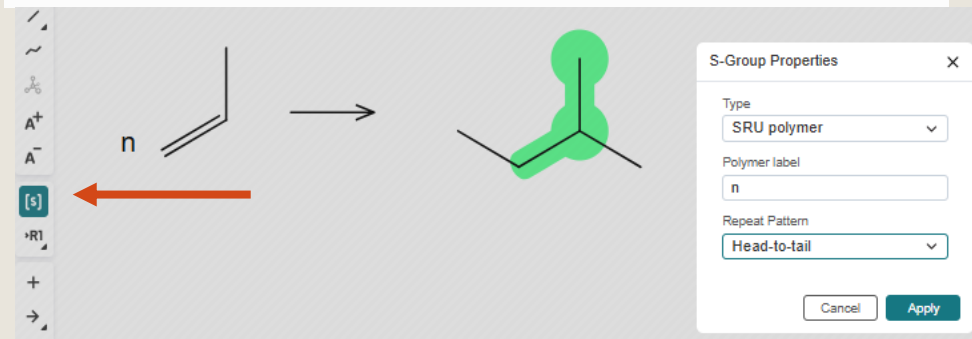
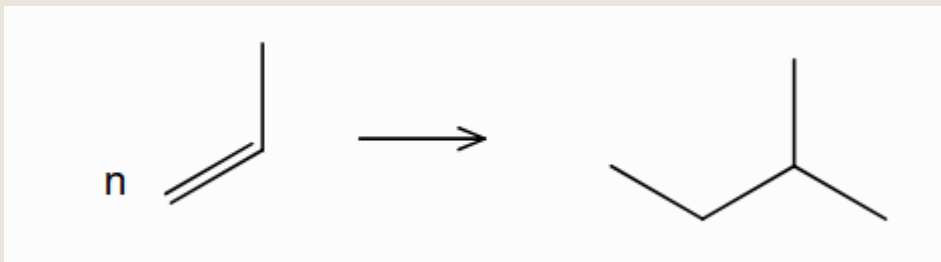
Edit | Preferences | Structure

Automaattinen plus-merkki toiminto
kannattaa ottaa pois.

Reaktionuolet:



Polymeerien tekeminen



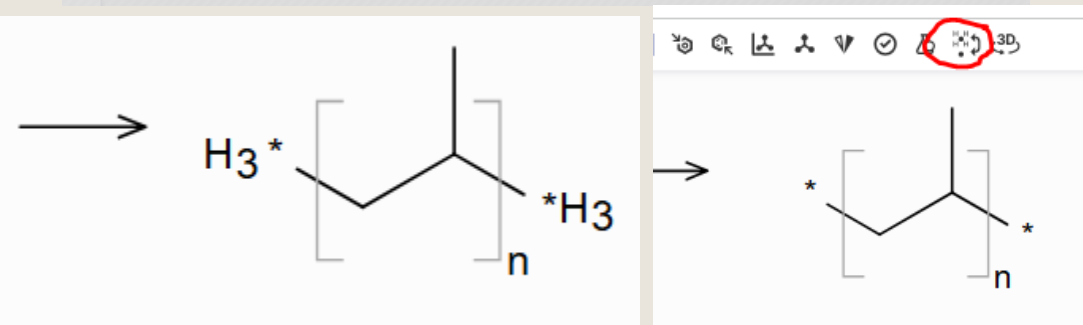
Piirrä polymeerin kaava viivakaavana ja lisää toistuvaan yksikköön ylimääräiset hiilet.

Valitse sivupalkista hakasulkeet [S]. Maalaa polymeeristä toistuvan yksikön atomit (ilman siitä lähteviä sidoksia).

Tee valinnat -> Apply

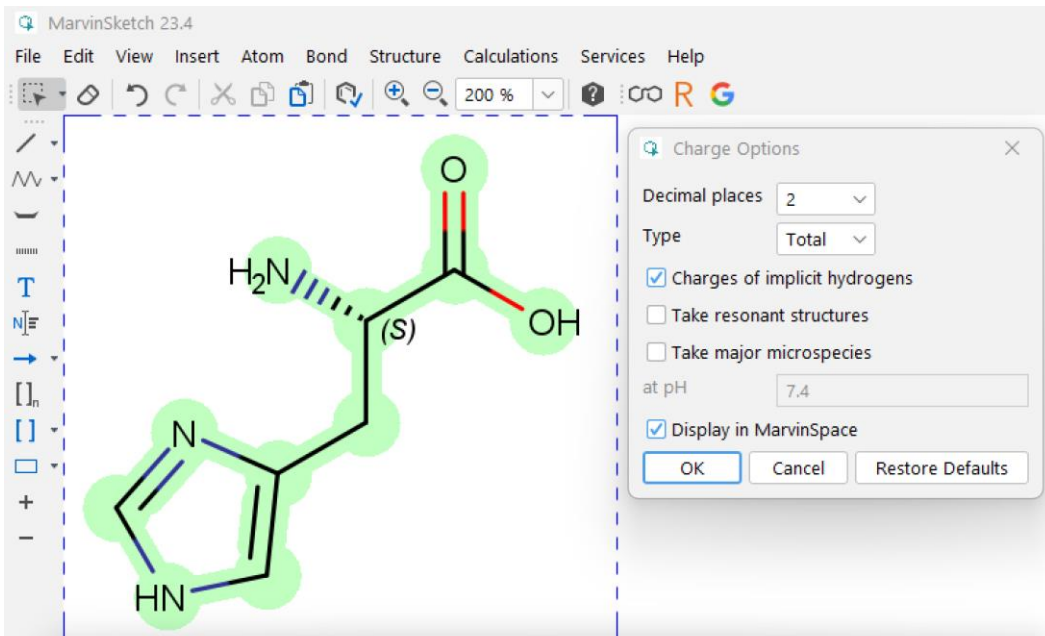
Klikkaa kahdesti yläpalkin eksplisiittisten vetyjen painiketta.

Jos haluat sidosviivakaavan, tee lopuksi muutokset asetuksista

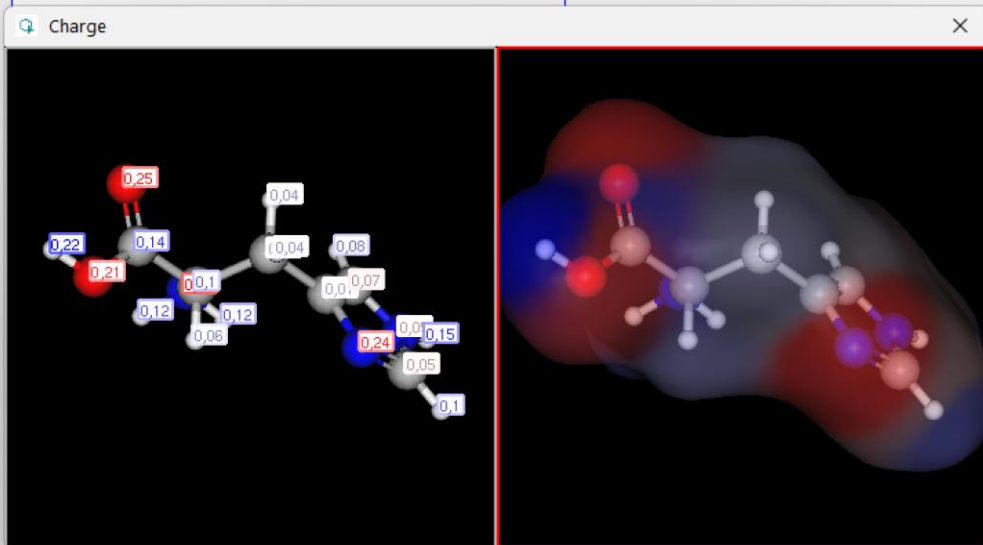


3D-mallinnus

Calculations | Charge



Ketcherin 3D-mallinnus EI TOIMI



Molekyylin 3D-kuvan avaaminen

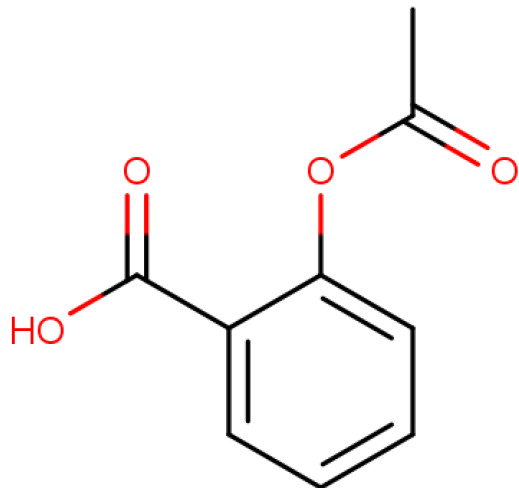
Calculations | Polarizability



MarvinSketch 21.20

File Edit View Insert Atom Bond Structure Calculations Services Help

200 %



Polarizability Options

Decimal places: 2

Type: Molecular Atomic

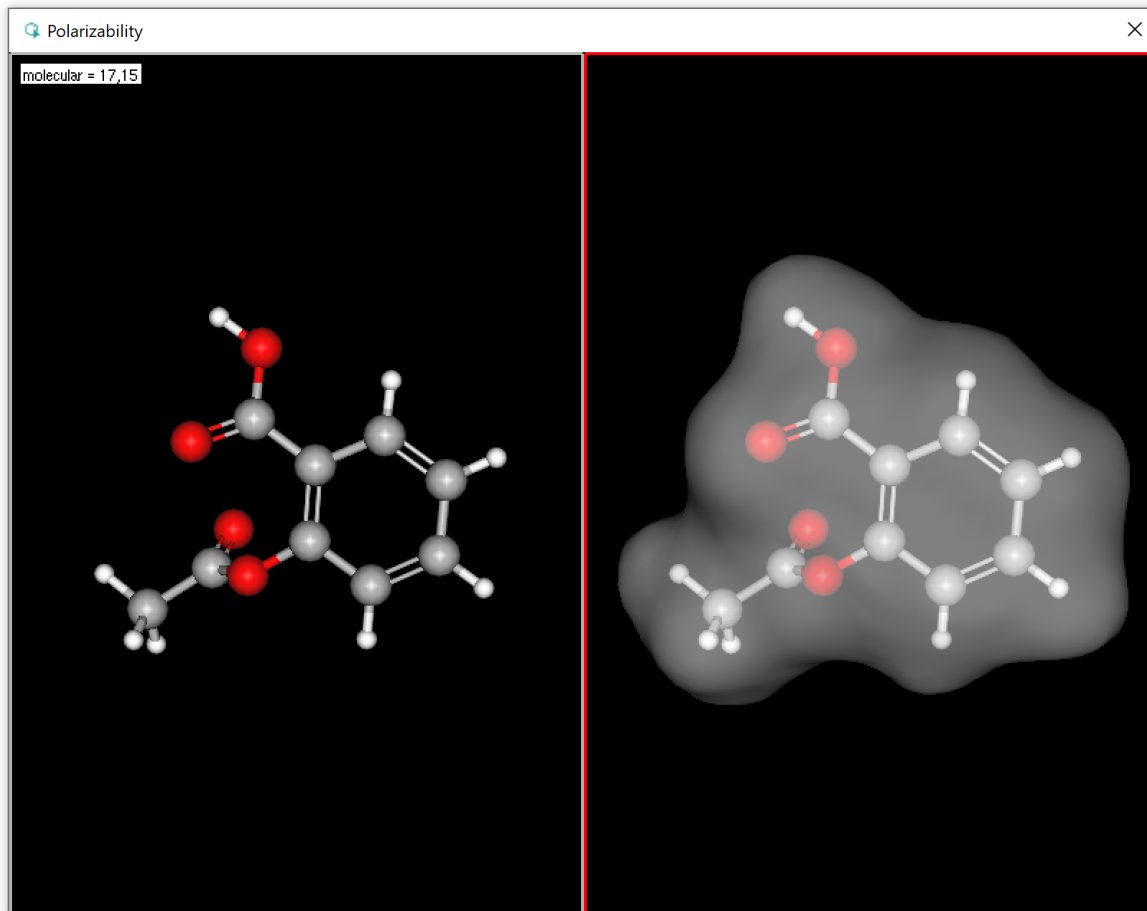
Take 3D geometry (Thole)

Take major microspecies

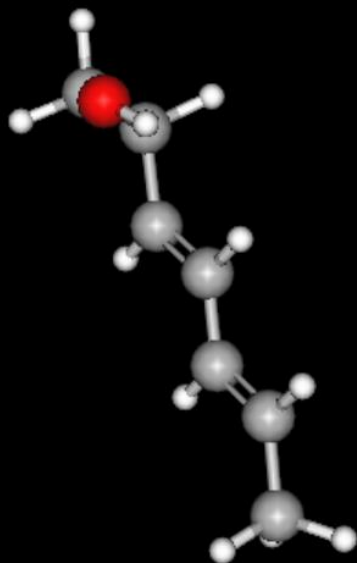
at pH: 7.4

Display in MarvinSpace

OK Cancel Restore Defaults



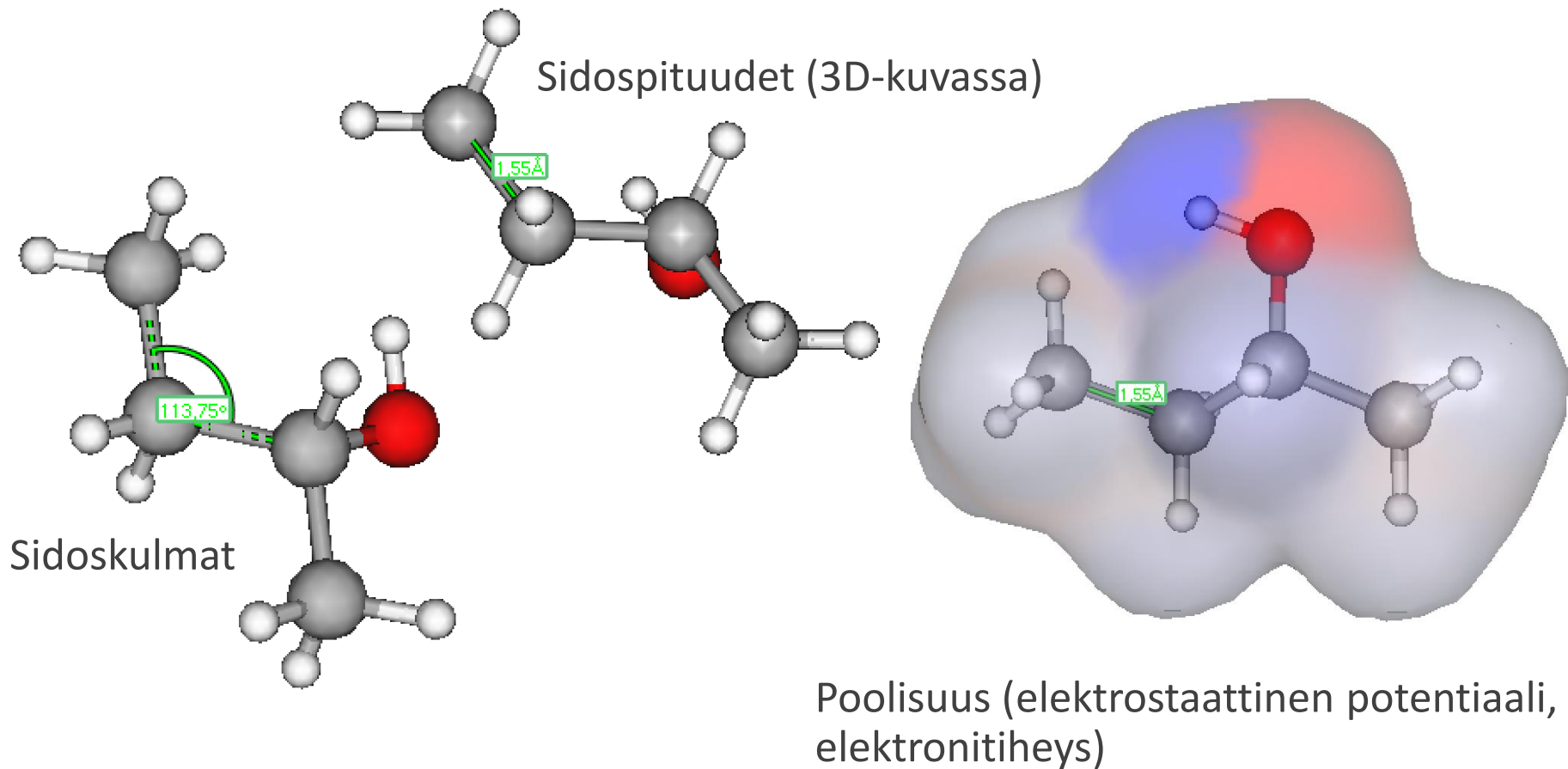
molecular = 13,77



MarvinSpace – 3D

Oli aiemmissä versioissa

Mitä jäi uupumaan, kun MarvinSpace poistui?



Spektroskopia MarvinSketchillä

