

MarvinSketch – lukion kemian opetuksen onni vai onnettomuus

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

1. Peruslähtökohtia

Abitti ja MarvinSketch

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

MarvinSketchin asennus

MarvinSketch-ohjelman asentamiseen on liittynyt runsaasti hankaluuksia. Opettajien oma osaaminen on joutunut koetukselle. Täytyy tunnistaa laitteet käyttöjärjestelmä ja sen 32/64-bittisyys, varmistaa Java-ympäristön olemassa olo (asennuksessa ohjelma ilmoittaa, jos ei ole) ja vaatii asennettavaksi vielä oikean version 32/64-bittisen. Opastusta

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

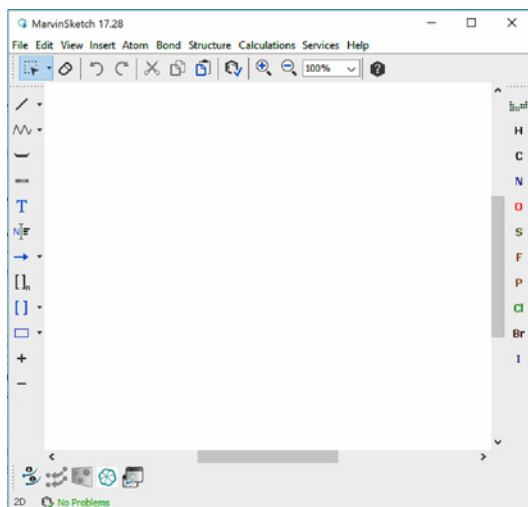
MarvinSketch -ohjelma on maksullinen ohjelma, se voidaan ladata kokonaisuudessaan asennettavaksi koneelle. Ohjelman ilmainen ja lisenssiversio asennetaan samasta ohjelmapaketista. Ainut ero on siinä, onko ohjelmaan asennettu opettajan hankkima lisenssi vai ei. Abitti-ympäristöstä toimii ei-lisenssi-versio. Lisenssin myötä ohjelmassa avautuu lisää toiminnallisuuksia mm. Calculations -valikosta. Lisenssin hankintaa ja asentamista on esitelty em. diasarjassa.

Itse suosittelen opettajalisenssin hankkimista myöhemmin esillä tulevien syiden vuoksi. Lisenssitiedoston hakee opettaja, joka voi sen sitten jakaa oppilailleen haluamallaan tavalla.

MarvinSketch ja perustoiminnallisuudet

MarvinSketchin perustoiminnallisuudet välittyvät mainiosti ohjelman käyttöliittymästä. Molekyylin rungon rakentaminen erilaisina sidoksineen (vasen reuna), eri alkuaineiden määrittelyt (oikea reuna), valmiit painikkeet joihin toiminnallisuuksiin (alareuna). Valikoissa on runsaasti toiminnallisuuksia, joiden hyödyntäminen toteutuu parhaiten kokeilemalla erilaisia variaatioita.

MarvinSketch-ohjelman ominaisuuksia ja perusohjeita löytyy ohjelmaa varten luodulta sivustolta Peda.netistä: <https://peda.net/id/bf328b68656>. Sivustolle on vapaa pääsy.



Kuva 1. MarvinSketch – aloitus.

Tässä artikkelissa sivutaan joitakin kemian opetuksen kannalta mielenkiintoisia kohtia, joissa MarvinSketch-ohjelma esittää omaa rooliaan.

2. MarvinSketchin pedagoginen merkitys ja lukion kemian kurssit

Yleisesti molekyylihallinnuksesta ja mallien käytöstä

Tähän asti molekyylihallinnusohjelmien käyttö on ollut riippuvaista siitä, miten laajasti ja miten monella oppilaalla on oppitunnilla käytettävissä tietokone. Nykyään, kun lukioissa on käytännössä läppäripakko (tai koulu tarjoaa), molekyylihallinnusohjelmien asentaminen on selvä – ehkä ei vielä kaikilla kuitenkaan rutiinia? Pitkään käytettiin ChemSketch-ohjelmaa, tai Avogadro (kuten itse käytin). Myös Molview.org-palvelua (selainpohjainen molekyylihallinnusohjelma) on käytetty laajasti. Näistä on esittelyä aiemmissa blogipostauksissani.

Uuden ohjelman, MarvinSketch, myötä ohjelmien hyödyntämiseen tulee selkeästi uusia ulottuvuuksia ja mahdollisuuksia, jotka vaikuttavat merkittävästi kemian opetuksen sisältöihin ja painotuksiin. Itse kuitenkin lasken näiden merkityksen ja vaikutuksen tulevan eteen vasta KE2-kurssin myötä, jolloin niistä otetaan irti oikeat tehot.

Kemia 1 -kurssi

Opetussuunnitelman mukaan Kemiaa kaikkialla (KE1) kurssin tavoitteena on mm., että opiskelija osaa tutkia ... erilaisia malleja käyttäen erilaisia kemian ilmiöitä ... osaa käyttää aineen ominaisuuksien päättelyssä aineen rakenteen malleja, jaksollista järjestelmää ja tietolähteitä. Kurssin keskeisenä sisältöä on mm. aineiden ominaisuuksien selittäminen aineen rakenteen, kemiallisten sidosten ja poolisuuden avulla.

Lukion kemian 1.kurssin on kaikille pakollinen, joten kurseilla on mukana myös lukiolaisia, joille tämä kurssi on ainut kemian kurssi lukioaikana. Kurssin tavoitteena voi olla toisaalta motivointi kemian jatko-opintoihin lukiossa ja/tai varmistaa kemian perusasioiden hallinta ja mikrotason ilmiöiden mallintamisen taidot (muun muassa).

Molekyylihallinnusohjelmista itse olen käyttänyt ”vain” Molview.org-ohjelmaa 1.kurssilla, koska se tukee mainiosti – ja helpommin opittavana – poolisuuden opettamista. Kurssilla ei varsinaisesti käsitellä orgaanisen kemian reaktioita eikä yleensä orgaanisia molekyyliä, kuten sitten tapahtuu KE2-kurssilla. Tällä kurssilla on tukeuduttava

yläkoulussa opittuun, mikä osaltaan oli varmasti monelle sekä yllätys että harmitus. Tosin onhan KE1-kurssi muutenkin yläkoulun kemian kertausta. PS. Jos tämä oli tarkoitus, monelle kemiaa pitemmälle opiskelevalle tässä syntyy joutavaa tyhjäkäyntiä.

Kemia 2 -kurssi

KE2-kurssi on uudessa opetussuunnitelmassa selkeämmin painottunut orgaanisen kemian asioihin. Kunhan ainemäärä- ja konsentraatioasiat on opetettu KE1-kurssilla (mitä siis suosittelen), KE2-kurssilla on oikeasti mahdollisuus paneutua opetussuunnitelman mukaisiin teemoihin ja myös uutena tulleeseen spektroskopiaan, mikä on sitä nykyaikaisempaa (analyttistä) kemiaa, kuin perinteiset sakkareaktiot ja hopeapeilit (vaikka niitäkään ei kannata unohtaa – tosin missä laboratoriossa vielä aldehydi todennetaan hopeapeilikokeella?).

Viivakaava vai täydellinen rakennekaava vai mikä?

Orgaanisessa kemiassa on vakiintunut käytäntö piirtää molekyyliä viivakaavoilla ja myös YTL on tulkinnut ne riittäviksi oikeiden rakennekaavojen sijaan. Juurikaan ei siis vaadita ”täydellisiä rakennekaavoja”, joihin on piirretty kemiallisten merkkien lisäksi atomien väliset sidokset.

MarvinSketch -ohjelma tuo asiaan vielä lisää mutkia matkaan. Sen mahdollistaa monenlaisia viiva-, hybridi-, rakennekaavoja. Näiden osalta täytyy selkeästi sopia jotain, ettei tulkinnat mene ihan mahdottomiksi. Tässä vieressä yksi linjaus – kova, mutta selkeä. MarvinSketch-sivustolta löytyy tarkempi kuvaus, mitä asetuksia tämä edellyttää itse ohjelmassa.

Joko viivakaava tai täydellinen rakennekaava?

On valittava joko **viivakaava tai (täydellinen) rakennekaava**, kun piirretään orgaanisia molekyyliä!

Alla olevat **EIVÄT KELPAA!**

The image shows a screenshot of the MarvinSketch software interface. At the top, there are two buttons: 'JOKO' (highlighted in yellow) and 'TAI' (highlighted in yellow). Below these buttons, there are two chemical structures: a skeletal structure of 1-butanol on the left and a fully expanded structure of 1-butanol on the right. Below the screenshot, there are four chemical structures of 1-butanol, each with a different representation: a skeletal structure, a semi-condensed structure, a condensed structure, and a fully expanded structure with all atoms and bonds shown.

Kuva 2. Viivakaavan erilaisia muotoja tarjolla.

Näissä rakennekaavojen kuvauksissa on ollut jo nyt horjuvuutta yo-tehtävissäkin. Jotta opetamme samaa asiaa ja myös yo-koetehtävät sisältävät selkeästi vain yhdessä sovittua (ja myös kaikissa kirjoissa käytössä olevaa) formaattia, näistä on sovittava pikaisesti. Mitä mieltä itse olet?

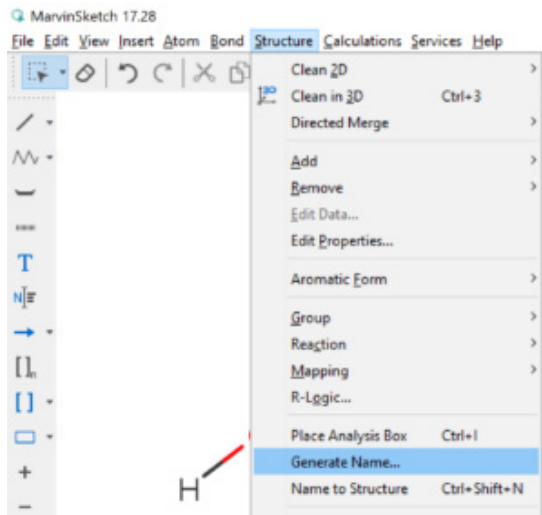
Orgaanisten yhdisteiden nimeäminen

Kysymys siitä, miksi lukiossa opiskellaan orgaanisten yhdisteiden nimeämistä, tulee ajankohtaiseksi MarvinSketchin laajemman käytön myötä. Ei vanhassa ja eikä uudessakaan lukion opetussuunnitelmassa mainitaakaan mitään orgaanisten yhdisteiden nimeämisestä. Nykyisen käytännön on siis pitkältä määrittänyt oppikirjat ja oppikirjailijat. Ja tähän päälle myös YTL on maustanut soppaa tuomalla ylioppilaskokeissa oman tehtävätyypin ”nimeä yhdisteet”.

Nimeäminen on tietenkin oma osa-alueensa kemiassa – pulmalliseksi sen tekee se, että hyvin nopeasti yhdiste saa triviaalinimen, josta on lähes mahdoton päätellä molekyylin rakennekaavaa, ei edes mukana olevia alkuaineita (esim. parasetamoli, bromitymolisininen, mönjä). Onko lukion oppimäärässä mielekästä tähän käyttää aikaa? Funktionaalisten ryhmien tunnistaminen ja yhdisteryhmiin luokittelu on toki aivan eri asia – nimistä huolimatta.

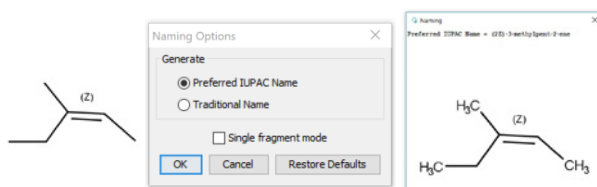
MarvinSketchin ”ilman lisenssiä” -versiokin antaa ohjelman käyttäjän määrittellä molekyylin nimen. Tähänkin saakka on ollut opettajakohtaista se, miten syvällisesti orgaanisten yhdisteiden nimeämistä opetetaan. Yo-kokeissa on välillä ollut niin nimestä rakennekaavaksi kuin viivakaavasta nimeksi tehtäviä. Onko tämä ”ulko-opettelu” ollut mielekästä tai edes välttämätöntä, olkoon oma keskustelunsa – sitä pohdintaa ei enää tarvitse tehdä, koska MarvinSketch antaa rakenteelle nimet ja myös (jos tietää englannin kielisen nimen) nimelle rakenteen (eri versioissa hieman eri paikoissa valikoissa).

Kun ohjelma suoltaa nimet pienellä vaivalla, on paikallaan miettiä nimeämiseen liittyen uudenlaista pedagogista asetelmaa – ei vain sitä, että opetellaan, miten ohjelma tuottaa nimen tai toisinpäin. Orgaanisten molekyylien kohdalla on tärkeää, että lukiolainen tunnistaa funktionaalisen ryhmän ja ymmärtää rakenteen (osaa luokitella molekyyli eri yhdisteryhmiin), nimen tuottaminen ei niinkään kuulu syvällisempää osaamiseen. Runomitat ovat kivoja (metaani, etaani, propaani, butaani, pentaani, heksaani, heptaani, oktaani), mutta eivät lisää kemiaa asiaan.

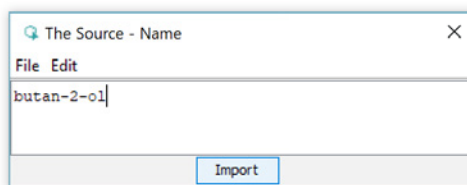


Kuva 3. Rakenteesta nimeen.

MarvinSketch generoi rakenteesta nimen (Structure | Generate Name ...) ja myös nimestä rakenteen (Structure | Name to Structure)



Kuva 4. Miten rakenteesta tulee nimi...



Kuva 5. .. ja nimestä rakenne.

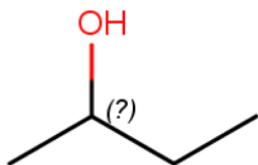
Toki oman pienen pulman teettää englannin kielisyys, mutta miksi se olisi ongelma. Ohjelma tunnistaa joka kaksi eri nimeämiskäytäntöä 2-butanoli ja butan-2-oli.

Isomeriaa – onko tulevaisuudessa cis-trans-isomeria opetettava E/Z-isomeriana?

MarvinSketch tunnistaa (ei-lisenssiversiossa!) isomeriaa. Nyt kysymykseksi tulee, onko kirjoissa ja oppitunneilla puhuttava cis-trans-isomeriasta vai E/Z-isomeriasta (käytännössä sama asia, kemistille ei ehkä aivan niin, mutta lukion kemiassa kyllä).

MarvinSketch tuntee vain E/Z-isomerian ja R/S-isomerian, kun puhumme stereoisomeriasta. Tämä ehkä tuntuu vain tulkinta-asialta, mutta MarvinSketch antaa ja näyttää nämä. Esim. kysymys siitä, mikä hiili-atomia on asymmetrinen (kiraalinen) on triviaali, koska ohjelma näyttää kaikki (ei toki anna *-merkkiä ko. kohtaan, vaan kysymysmerkin – jos ei ole pyydetty ohjelmalta tarkennusta – kts. kuva alla).

Eli, miten tulevaisuudessa opetamme stereoisomerian



Kuva 6. Peilikuvaisomeriaa?

merian ja huomioimme MarvinSketch-ohjelman valmiiksi antamat tiedot? Otamme ja opetamme cis-trans-isomerian ja E/Z-isomerian yhdessä – rakkaalla lapsella on monta nimeä -kuviolla.

Peilikuvaisomerian suhteen täytyy miettiä joko syventävää ulottuvuutta tai jotain muuta.

3. MarvinSketch ja reaktioyhtälöt (KE3-kurssi)

Mitä uusi LOPS sanoo?

Uuden opetus suunnitelman myötä reaktioita käsitellään laajasti KE3 – Reaktiot ja energia -kurssilla. ”Kurssin tavoitteena on, että opiskelija (1) osaa käyttää ja soveltaa reaktioihin liittyviä käsitteitä jokapäiväisen elämän, ympäristön, yhteiskunnan ja teknologian ilmiöissä, (2) osaa tutkia kokeellisesti ja erilaisia malleja käyttäen reaktioihin liittyviä ilmiöitä ja (3) ymmärtää aineen ja energian häviämättömyyden merkityksen kemiassa.” (LOPS15).

Kurssin keskeisiksi sisällöiksi on listattu:

- kemian merkitys energiaratkaisujen ja ympäristön kannalta
- kemiallisen reaktion symbolinen ilmaisu ja tasapainottaminen
- epäorgaanisten ja orgaanisten yhdisteiden reaktioita sekä niiden sovelluksia
- aineen häviämättömyys kemiallisessa reaktiossa ja sen yksinkertainen laskennallinen käsittely
- energian häviämättömyys kemiallisessa reaktiossa, sidosenergia ja Hessin laki
- kaasujen ominaisuudet ja yleinen tilanyhtälö

- reaktioiden tutkiminen kokeellisesti, titrausanalyysimenetelmänä, tutkimustulosten käsitteily, tulkitseminen ja esittäminen

Reaktioyhtälöiden kirjoittaminen – erityisesti orgaanisen kemian molekyylien – on tuottanut oman tuskan. Kuten aiemmassa kappaleessa mainitsin, MarvinSketch mahdollistaa oikeiden ja useamman rakennekaavan (lue viivakaavan) tuottamisen yhdelle näytölle. Myös reaktioyhtälön tekeminen on optimoitu: piirtämällä reaktionuolen saat automaattisesti kahden edellä mainitun molekyylin (lähtöaineet) väliin plus-merkin. Tämä toisaalta sitten haittaa, jos reaktioita on useampia.

Reaktioyhtälöiden kirjoittaminen (piirtäminen) MarvinSketchillä

Tietokoneavusteisesti reaktioyhtälöiden kirjoittaminen tulee mielekkääksi, kun rakenteet ovat isompia ja kopioimalla aiemmin tehtyjä molekyyliä saa täsmälleen oikeat rakenteet jatkossa käsittelyyn. Perusrungon rakentamisen jälkeen on helppoa lisätä elementtejä, esim. katalyyttejä, reaktiomekanismiin liittyviä nuolia jne. Seuraavassa pari esimerkkiä.

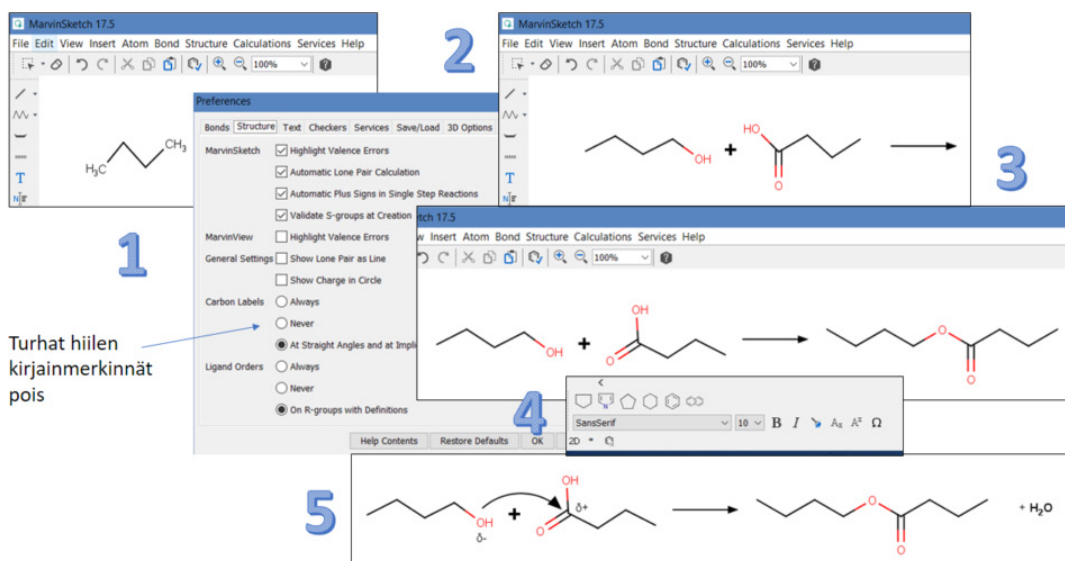
Esimerkki 1: Esteröitymisreaktion reaktioyhtälön kirjoittaminen (piirtäminen)

Eteneminen vaiheittain:

1. rakennetaan rakennekaavat (viivakaavat). Jos aiemmin oli jäänyt päälle hiiliketjun päähän merkitävät hiilet, ne kannattaa poistaa viivakaavasta.
2. kun molemmat lähtöaineet on piirretty, tuottamalla reaktionuoli, saadaan reaktioyhtälöön plus-merkki.
3. piirrettiin reaktiotuote (näitä rakenteita kannattaa käydä korjaamassa: valikosta Structure / Clean 2D tai pikanäppäimillä ctrl+2).
4. valitaan teksti-työkalu, vasempaan alareunaan tulee tekstieditorin toiminnat (ainakin versiossa 17.5.). Sieltä voi valita mm. alaindeksin ja yläindeksin merkinnät. Tällä työkalulla voi tuottaa niin reaktionuolen päälle esim. katalyytit ja kuten tässä esimerkissä veden molekyylikaavan.
5. kuvaan on piirretty ”auttavat” osittaisvaraukset tekstityökalulla ja kaarinuoli nuolityökalulla kuvaamaan reaktiomekanismia.

Reaktiotuotteen nimen voi pyytää ohjelman tekemään – valitaan valintatyökalulla reaktiotuote ja valikosta Structure / Generate Name. Voi vielä valita joko IUPAC- tai triviaalinimen (jos sellainen on olemassa).

Polymeerin rakentaminen MarvinSketch -ohjel-



Kuva 7. Esteröitymisreaktion reaktioyhtälön kirjoittaminen (piirtäminen).

malla on esitelty lyhyesti videolla osoitteessa: <http://bit.ly/2E18kZP>. Tämä on syntynyt osana MAOL:n TVT-koulutuksia.

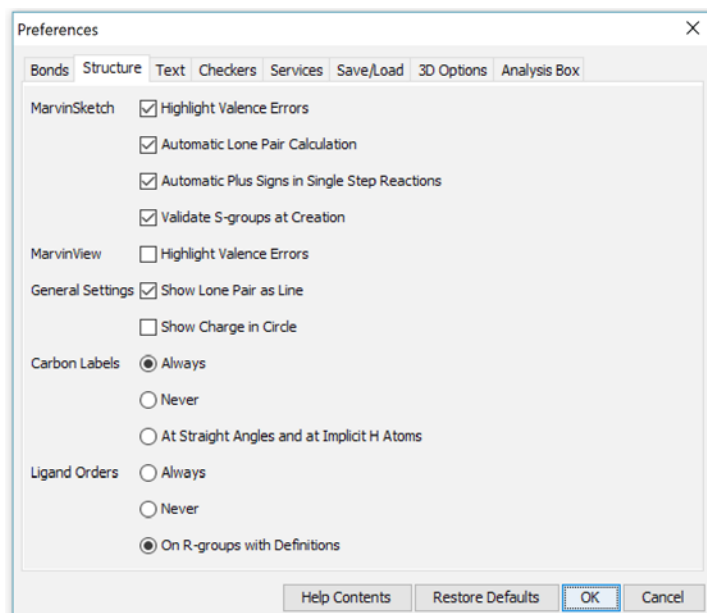
4. MarvinSketch ja vapaat elektroniparit - hieman kemian teoriaa

Vapaat elektronit parit (lone pair)

Vapaa elektronipari on yksittäisen atomin ulkoelektroneja (valenssielektroneja), jotka eivät ole yhdisteessä muodostamassa sidosta. Ne voivat muodostaa kovalenttisia koordinaatiosidoksia (toimia Lewis-emäksenä) luovuttaen elektroniparin toisen atomin kanssa muodostettavaan koordinaatiosidokseen. Esimerkkeinä tästä ovat esimerkiksi ammoniumioni, jossa tyyppi muodostaa neljännen sidoksen luovuttamalla vapaa elektroniparin vety-ionin kanssa muodostuvaan sidokseen. Tai hiilimonoksidissa, jossa hiilen hapen välissä olevasta kolmoissidoksesta kaksi muodostuu kovalenttisesta sidoksesta ja yhdessä koordinaatiosidoksesta, jossa happiatomi on luovuttanut yhden vapaan elektroniparinsa yhteiseen sidokseen.

MarvinSketch piirtää vapaat elektroniparit

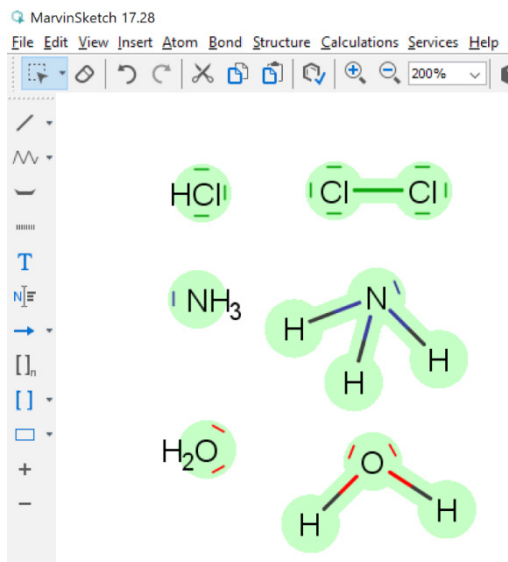
MarvinSketch-ohjelman saa näyttämään vapaat elektroniparit niin pisteinä kuin viivoina. Valinta viivan ja pisteen välillä tehdään Edit | Preferences -valikossa kohdassa General settings (kts. Kuva 8). Tämä ei vielä anna näkyviin vapaita elektronipareja.



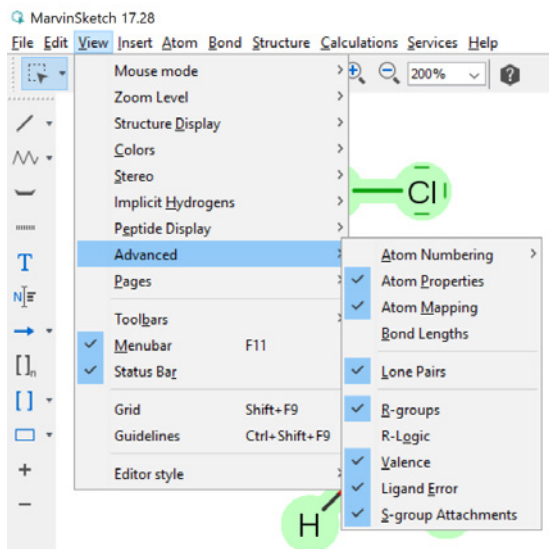
Kuva 8. Vapaiden elektroniparien näyttäminen.

Kun piirretään molekyyliä, täytyy miettiä, piirretäänkö myös atomien välisiä sidoksia näkyviin, jolloin vapaan elektroniparin merkitsemisellä on jotain mielekästä merkitystä.

Vapaat elektroniparin saadaan näkyviin valitsemalla View –valikosta Advanced | Lone Pairs (kts. **Kuva 10**).

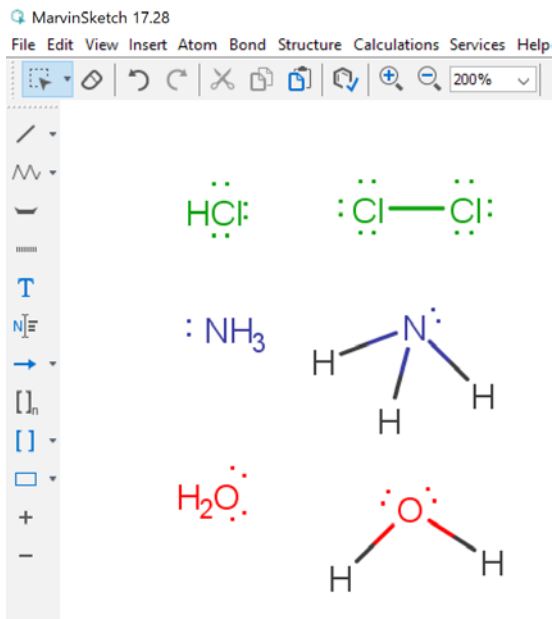


Kuva 9. Vapaat elektroniparit viivalla.



Kuva 10. Vapaat elektroniparit näkyviin.

Alempana on **Kuva 11**, jossa vapaat elektroniparit näkyvät pisteinä. Samat molekyyli, jossa elektroniparit merkitty viivalla.



Kuva 11. Vapaat elektroniparit pisteillä.

Miten opetetaan vapaat elektroniparit

Eli MarvinSketch piirtää vapaat elektroniparit – miten tämä asia nyt opetettaisiin. Olisiko nyt mahdollisuus miettiä Lewis-rakenteiden opettamista hieman syvällisemmin. Ohjelmassa yksi valinta (tai sen muuttaminen) osoittaa, mitä viivalla tarkoitetaan. Tarvitseeko tätä enää kysyä esim. yo-kirjoituksissa. Vai voisiko tässä jo kysellä Lewis-emästen perään?

5. MarvinSketch ja isomerian opetus

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-ympäristö, se näkyy kysymysmerkinä, 3D-ympäristössä se antaa R/S-merkinnän sen mukaan kumpi se on) ja tulkitsee onko yleensäkin cis-trans-isomeriaa (tai oikeammin E/Z-isomeriaa) molekyyliissä.

Peilikuvaisomerian opetus

Asymmetrisen, kiraalisen, hiilen tunnistaminen MarvinSketch-ohjelman myötä asettuu uuteen tilan-

teeseen. Opetuksessa lienee tähän asti asiaa lähestytty esimerkkimolekyylien kautta ja selittämällä, että kiraaliseen hiileen on kiinnittyneenä neljä erilaista ryhmää tai alkuaineatomia.

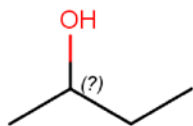
Kuvassa 12 (viivakaava) on ehkä se tavanomaisin esimerkki (2-butanoli) peilikuvaisomeriasta. Ohjelmalla voi nopeasti saada näkyviin kaikki atomit ja kaikki sidokset (hiilet näkyviin Edit | Preferences | Structure | Carbon labels ja kaikki vedyt sidoksilla Structure | Add | Explicit Hydrogens).

Kuvassa 13 (täydellinen rakennekaava) voidaan jo selkeästi nähdä kaikki neljä erilaista ryhmää tai atomia kiinnittyneenä kiraaliseen hiileen (tässä merkitty siis kysymysmerkillä ohjelman puolesta). Tehtäviä tehtäessä tuon kysymysmerkin saa toki pois, mutta jos ja kun oppilaille on MarvinSketch -ohjelman asennettuna, he saavat sen myös nopeasti näkyville.

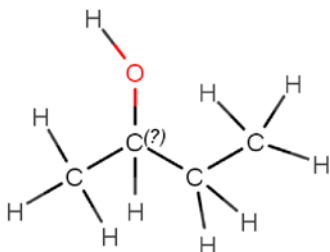
Tässä näky valinnat joilla saa kiraalisen hiilen näkyville (All / All Possible) tai pois (None).

Ohjelman avulla on helppo tutkia erilaisia molekyyliä ja niiden kiraalisuutta. Atomien vaihtaminen on helppoa ja ohjelma tunnistaa kiraalisuuden ”reaaliajassa”.

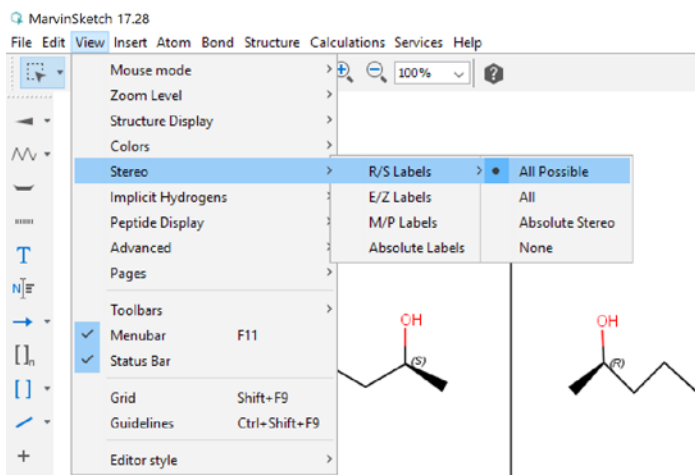
Pohdittava asia on, pitäisikö tehtävissä vaatia kirjaamaan se, onko kyse R- vai S-isomeerista, kun kerran ohjelma sen helposti antaa. Lukion oppimäärään tuskin kuuluu eikä liene paikallaan edes lisätä se, miten ko. kirjain määräytyy isomeerien osalta.



Kuva 12. 2-butanoli.



Kuva 13. 2-butanoli täydellisenä rakennekaavana.



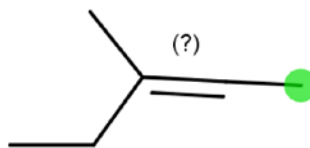
Kuva 14. Isomerian merkintöjen lisääminen.

R- ja S-isomerian merkitsemiseen liittyy lähinnä ohjelman käytön hallinnan varmistaminen ja/tai toisaalta juuri tämän molekyylin kolmiulotteisuuden ja tetraedrimäisen rakenteen (sp³-hybridisaation!) korostaminen.

Aiemmin piirretyt kaksi kuvaa todistaa hyvin sen, että myös täydellisen rakennekaavan piirtäminen on aina silloin tällöin paikallaan asioiden ymmärtämisen varmistamiseksi.

Cis-trans-isomerian opetus

MarvinSketch-ohjelma on käyttä cis-trans-isomerian käsitteitä, vaan E/Z-kirjaimia (entgegen – zusammen) käytännössä saman isomerialajin luokittelussa. Ohjelma taipuu myös siihen, että se antaa mahdollisuuden liikuttaa rakenneosaa niin, että kirjaimen vaihtuminen näkyy – tässä kuvassa, kun tilanne on vaiheessa, tulee kysymysmerkki.



Kuva 15. Cistrans-isomeriaa.

Tämä reaaliaikainen tulkinta antaa hyvän mahdollisuuden opettaa erot näiden kahden isomeerin välillä. Miten syvällisesti on tarpeen selittää E/Z-isomeerien ero, kun tilanne ei ole selkeästi nykyisen cis-trans-isomerian opetusajakauden esimerkeistä. ■