

Nimeämisosion Tiedosto-valikko

Tiedosto
Avaa oppitunti...
Kokoa oppitunti
Tulosta...
Kirjoittimen asetukset...
Paluu

Avaa oppitunti avaa ruudulle tiedosto-valikon valintaikkunan, josta voidaan avata oppitunti, joka on aikaisemmin tallennettu ohjelman Kokoa oppitunti osiossa.

Kokoa oppitunti aloittaa oppitunnin, jonka ohjelma itse muodostaa. Kun valitset tämän kohdan, ilmestyy ruudulle ikkuna, josta voit valita mitä orgaanisten yhdisteiden ryhmiä oppitunti sisältää.

Tulosta ja **Kirjoittimen asetukset** komentoja käytetään ruudulla olevan yhdisteen tulostamiseen. Tämä kohta saattaa olla hyödyllinen, jos kesken oppitunnin haluat tulostaa tietyn yhdisteen myöhempää käyttöä varten.

Paluu komento palauttaa sinut takaisin aloitusnäytölle.

Organica

Sisältö:

Aloitusnäyttö

Nimeäminen

Molekyylien muodostaminen

Oppituntien kokoaminen

Nimeämisen säännöt orgaanisessa kemiassa

Organica ohjelman on kehittänyt MediaCompaniet, joka on Systime (Tanska) nimisen yrityksen multimediaosasto. Organica on opetusohjelma orgaanisten yhdisteiden nimeämiseen, rakentamiseen ja kolmiulotteiseen esittämiseen.

Organica koostuu kolmesta osiosta:

Nimeäminen

Keskeinen osa ohjelmaa on nimeämisosio, jossa sinun tulee nimetä ruudulla esitetyt orgaaniset yhdisteet. Tässä osiossa voit valita joko aikaisemmin muodostetun oppitunnin tai ohjelman muodostaman oppitunnin. Jälkimmäisessä tapauksessa ohjelma muodostaa yhdisteet yhdestä tai useammasta orgaanisen yhdisteen ryhmästä.

Muodostaminen

Tässä osassa voit muodostaa molekyyliä, kiertää niitä haluamallasi tavalla kolmiulotteisesti tai tallentaa ne myöhempää käyttöä varten.

Oppitunnin kokoaminen

Ohjelman viimeistä osiota käytetään uusien oppituntien kokoamiseen. Voit valita yhdisteet nimeämisosioon muodostamiesi ja ohjelman muodostamien molekyylien hakemistosta.

Nimeäminen

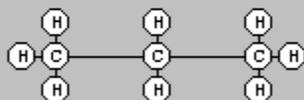
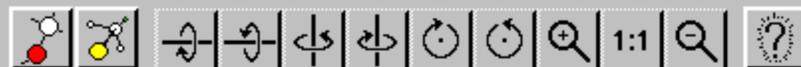
Organica -ohjelman nimeämisosion avulla voit harjoitella orgaanisten yhdisteiden nimeämistä. Ohjelma muodostaa uusia yhdisteitä tai avaat jo aikaisemmin tallennetun oppitunnin.

Yhdisteet tulevat ruudulle vuorotellen ja sinun tulee kirjoittaa niiden nimet ruudun alareunassa olevaan nimikenttään. Kun olet kirjoittanut nimen painat Enter-painiketta.

Jos annat ohjelman muodostaa yhdisteet, tulee sinun ensin valita Taso, Yritysten lukumäärä / yhdiste jne. valikon kohdasta **Käyttäjän valinnat|Asetukset** ja sitten valikosta kohta **Tiedosto|Muodosta oppitunti**.

Kun käyt läpi oppituntia, ohjelma kertoo sinulle koko ajan suoriutumisesiasi pisteiden avulla.

Jos haluat lisätietoja ohjelman valikoista tai painikkeista, napauta hiirellä kyseistä kohtaa kuvasta:

Nimi:

Muodostaminen

Organica -ohjelman tässä osiossa voit suunnitella omia molekyylijäsi.

Voit tarkastella yhdisteitäsi kaksi- ja kolmiulotteisesti ja värien ja symbolien avulla.

Työtilassa olevat atomit ovat keltaisen renkaan ympäröimiä, jos niissä on "tyhjiä sidoksia". Atomin tyhjä sidos tarkoittaa, että atomilta puuttuu sidos toisiin atomeihin.

Organica -ohjelmassa olevien sidosten lukumäärä on:

Nimi	Symboli	Sidoksia	Väri
Hiili	C	4	harmaa
Typpi	N	3	sininen
Happi	O	2	punainen
Rikki	S	2	keltainen
Bromi	Br	1	ruskea
Kloori	Cl	1	tummanvihreä
Fluori	F	1	vaaleanvihreä
Jodi	I	1	lila

Sidoksia ei ole mahdollista muodostaa (esim. rikki) enempää eikä vähempää kuin tässä on määritetty, vaikka on olemassa molekyylijä, joissa sidosten lukumäärä on erilainen.

Ruudun alareunassa on nimikenttä, johon sinun tulee kirjoittaa muodostamasi molekyylin nimi. Molekyyli tallennetaan tällä nimellä ja jos sitä käytetään myöhemmin nimeämisoppitunnilla, on tämä nimi kirjoitettava vastaukseksi nimeämisosiossa.

Atomin lisääminen työtilassa tapahtuu valitsemalla se ruudun vasemmassa reunassa olevasta työkalupalkista. Sitten napautat hiirellä työtilan sisäpuolella kohtaa, johon haluat lisätä atomin. Kahta atomia ei ole mahdollista sijoittaa päällekkäin.

Jos haluat siirtää olemassaolevan atomin, viet hiiren osoittimen kärjen siirrettävän atomin päälle ja pidät hiiren vasemman painikkeen alas painettuna. Siirrä atomi haluamaasi paikkaan ja päästä ylös hiiren vasen painike.

Liittäessäsi kaksi atomia yhteen valitset sidostyyppin ruudun vasemman reunan painikkeilla. Sijoita hiiren osoittimen kärki ensimmäisen atomin päälle. Pidä hiiren vasen painike alhaalla ja raahaa hiiren osoitin toisen atomin päälle. Lopuksi vapautat hiiren painikkeen ja ohjelma lisää sidoksen.

Jos haluat poistaa atomin tai sidoksen työtilasta, napautat hiiren oikeata painiketta poistettavan atomin tai sidoksen päällä.

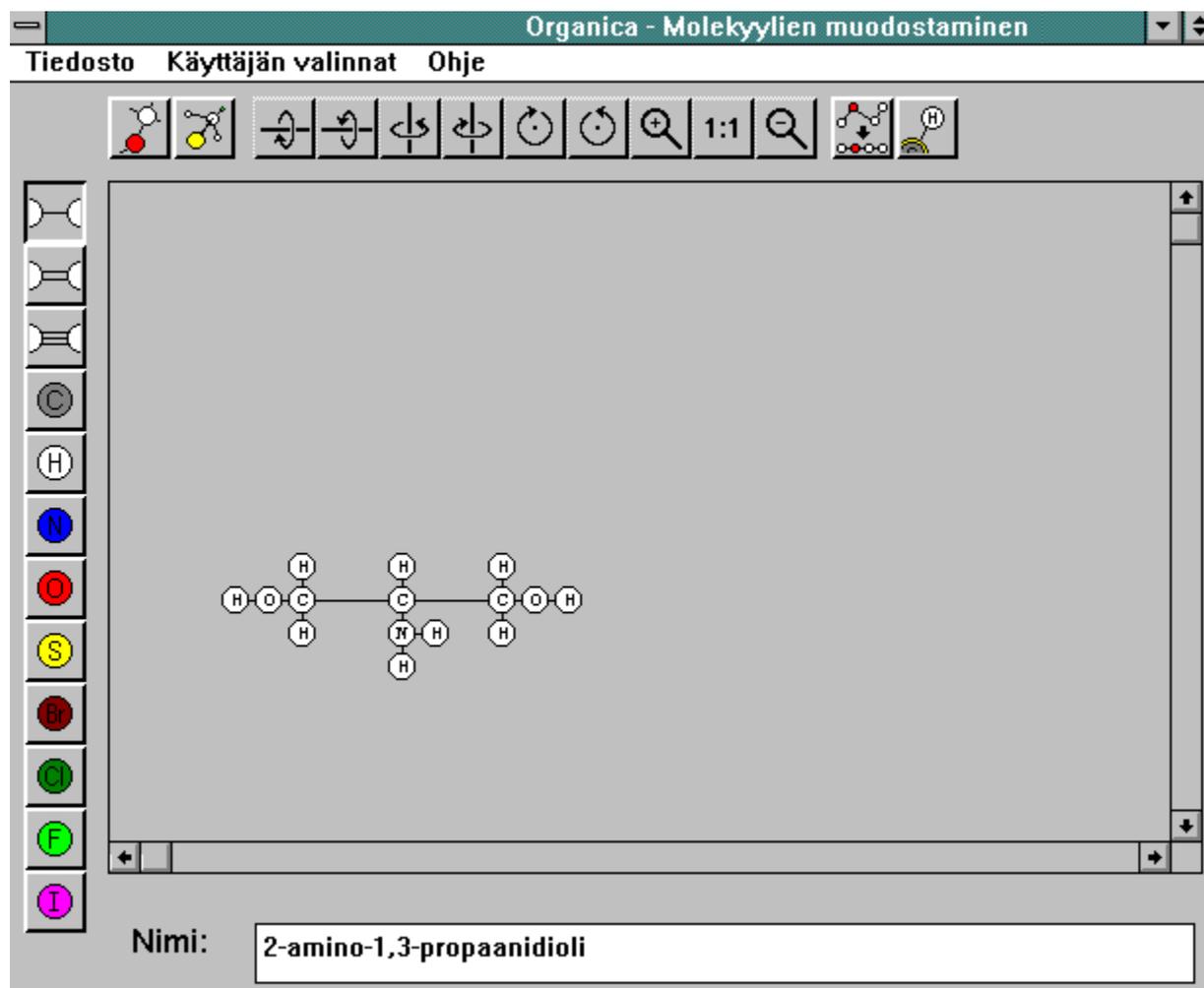
Huomaa, ettei ohjelma pysty tallentamaan tai järjestämään molekyylijä, joissa on vielä 'avoimia' sidoksia.

Lisäksi ei ole mahdollista muodostaa yhdisteitä, joissa on kaksi syklistä tai aromaattista rengasta kiinni toisissaan.

Molekyylin atomeja ei ole myöskään mahdollista järjestää manuaalisesti. Jos järjestä-painike ei anna toivottua tulosta, tulee tätä molekyylä välttää.

Aromaattinen rengas luodaan muodostamalla renkaaseen vuorotellen kolme tyydyttyynyttä sidosta ja kolme kaksoissidosta. Sen jälkeen napautetaan järjestä-painiketta.

Napauttamalla kuvan valikoita ja painikkeita, saat niistä lisätietoja:



Oppituntien kokoaminen

Organica -ohjelman nimeämisosiossa on mahdollista käyttää aiemmin koottuja oppitunteja. On siis mahdollista muodostaa oppitunteja, joissa harjoitellaan vain tiettyä teemaa: esimerkiksi oppituntiin voi kuulua vain alkaaneja joissa on substituenttina metyyliryhmä.

Organica -ohjelman oppituntiosioon kuuluu kaksi ikkunaa. Vasemmanpuoleisesta ikkunasta voit katsoa mitkä yhdisteet sinulla on käytössäsi ja oikeanpuoleisessa näkyvät oppituntiin sisältyvät yhdisteet.

Hakemistoikkuna sisältää kaikki valittuun hakemistoon.kuuluvat orgaaniset yhdisteet. Ne ovat aakkosjärjestyksessä.

Oppitunti-ikkuna sisältää kaikki oppituntiin kuuluvat molekyylit. Ne on lueteltu samassa järjestyksessä kuin ne esiintyvät oppitunnissa ja sama yhdiste voi esiintyä useammankin kerran.

Kun lisäät uusia yhdisteitä hakemistoon, voit valita käytätkö Organican muodostamisosiota muodostaaksesi uusia molekyylejä itse tai voit napauttaa ruudun alareunassa olevaa muodosta -painiketta. Tämä painike muodostaa satunnaisen yhdisteen samalla tavalla kuin nimeäminosio muodostaa molekyylin. Kun napautat painiketta ensimmäisen kerran, ilmestyy ruudulle ikkuna , josta valitset mitkä yhdisteryhmät haluat ottaa mukaan. Myöhemmin voit vaihtaa orgaanisia yhdisteryhmiä vain valisemalla valikosta **Käyttäjän valinnat|Orgaaniset yhdistetyypit**.

Myös ohjelma muodostaa yhdisteet **Käyttäjän valinnat|Asetukset** -valikon määritysten mukaisesti.

Pienet nuolet mahdollistavat muodostettujen yhdisteiden kopioimisen ja siirtämisen hakemistoon ja kopioimisen ja siirtämisen hakemiston ja oppitunnin välillä. Lisäksi voit poistaa yhdisteitä siirtämällä ne roskakoriin.

Jos haluat lisätietoja, napauta kuvan painikkeita tai valikoita:

Hakemisto sisältää:

1.4-pentadiyyini
1-butyyni
1-fluori-2-jodibutaani
1-kloori-2-metyylipropaani
1-pentyyni
2-bromi-1-buteeni
2-bromi-2-cis-buteeni
2-butyyni
2-jodipropaani
2-kloori-4-metyylipentaani
2-metyyli-1-buteeni
2-metyylipropeneeni
2-pentyyni
3-buteenihappo



Oppitunti sisältää:

metaani
etaani
propaani
butaani
pentaani
heksaani
heptaani
oktaani
nonaani
1-pentyyni



Orgaanisten yhdisteiden ryhmät

Organica -ohjelman avulla voidaan harjoitella seuraavien orgaanisten yhdisteryhmien nimeämistä. Saat lisätietoa nimeämiskäytännöstä valitsemalla haluamasi orgaanisen yhdisteryhmän listasta:

Yleiset säännöt

Alkaanit

Alkeenit

Alkyynit

Sykloalkaanit

Alkoholit

Aldehydit

Ketonit

Karboksyylihapot

Eetterit

Amiinit

Esterit

Aromaattiset yhdisteet

CFC-kaasut

Yhdisteet, joissa on useampi kuin yksi funktionaalinen ryhmä

Alkaanien nimeäminen

Kaikki alkaanien nimet päättyvät -aani. 1-10 hiiliatomia sisältävien suoraketjuisten alkaanien nimet ovat:

CH ₄	metaani
C ₂ H ₆	etaani
C ₃ H ₈	propaani
C ₄ H ₁₀	butaani
C ₅ H ₁₂	pentaani
C ₆ H ₁₄	heksaani
C ₇ H ₁₆	heptaani
C ₈ H ₁₈	oktaani
C ₉ H ₂₀	nonaani
C ₁₀ H ₂₂	dekaani

Orgaanisten yhdisteiden nimeämisen peruseriaate on substituutio. Siten haarautuneiden alkaanien katsotaan olevan peräisin yhdisteen pisimmästä ketjusta, johon on substituoitunut lyhyempiä ketjuja. Lyhyempiä substituenttaketjuja kutsutaan alkyyliryhmiksi. Alkyyliryhmäksi sanotaan sitä hiilivedyn osaa, joka jää jäljelle, kun hiiliketjusta otetaan yksi vetyatomi pois. Ne nimetään korvaamalla alkaanien -aani -pääte -yyli -päätteellä:

CH ₃ -	metyyli
C ₂ H ₅ -	etyyli
C ₃ H ₇ -	propyyli
C ₄ H ₉ -	butyyli
C ₅ H ₁₁ -	pentyyli
C ₆ H ₁₃ -	heksyyli
C ₇ H ₁₅ -	heptyyli
C ₈ H ₁₇ -	oktyyli
C ₉ H ₁₉ -	nonyyli
C ₁₀ H ₂₁ -	dekyyli

Haarautuneet alkaanit nimetään seuraavan käytännön mukaisesti:

- Etsitään hiilivedyn pisin hiiliketju. Jos pisin ketju voidaan valita useammalla kuin yhdellä tavalla, valitaan ketju, joka sisältää eniten sivuketjuja (substituentteja).
- Perusketju numeroidaan siten, että sivuketjut (alkyyliryhmät) saavat mahdollisimman alhaiset paikkanumerot. Jos alhaisimmat paikkanumerot voidaan antaa kahdella eri tavalla, annetaan aakkosissa aikaisemmin esiintyvälle sivuketjulle (alkyyliryhmälle) pienin mahdollinen numero.
- Pääketjun nimi on sama kuin vastaavan haarautumattoman hiiliketjun nimi. Tämä nimi muodostaa yhdisteen nimen loppuosan.
- Huomioi sivuketjujen sijainnit.
- Yhdisteen nimen alkuosan muodostavat sivuketjujen (alkyyliryhmien) nimet, jotka luetellaan aakkosjärjestyksessä paikkanumeroiden kanssa. Jos

perusketjuun on liittynyt useampia samanlaisia ryhmiä, käytetään moninkertaistavia etuliitteitä di, tri, tetra jne. (jotka eivät vaikuta aakkosjärjestykseen) ja substituenttien paikkanumerot ilmoitetaan pilkuilla toisistaan erotettuina.

Esimerkkejä

2,3,5-trimetyyliheksaanissa on perusketjussa kuusi hiiliatomiä. Kun nämä hiiliatomit numeroidaan yhdestä kuuteen, metyyliiradikaalit ovat sitoutuneet hiiliatomeihin 2, 3 ja 5. Huomaa ettei nimi ole 2,4,5-trimetyyliheksaani b) -kohdan säännön mukaan, sillä 2,3,5, on alhaisempi kuin 2,4,5.

5-metyyli-4-propyylinonaanissa on 9 hiiliatomiä perusketjussa. Kun nämä hiiliatomit on numeroitu 1-9, on metyyliiryhmä liittynyt hiiliatomiin numero 5 ja propyyliiryhmä hiiliatomiin numero 4. Huomaa, ettei nimi ole 5-metyyli-6-propyylinonaani e)-kohdan mukaan, sillä m on ennen p:tä aakkosissa.

- f) Myös sivuketjut voivat olla haaroittuneita. Tässä tapauksessa ne nimetään haaroittuneiden alkaanien nimeämismenetelmällä, mutta pääte on -yyli. Haaroittuneiden sivuketjujen nimet laitetaan sulkeisiin ja ne sijoitetaan perusketjun nimen eteen haaroittuman **ensimmäisen** kirjaimen määräämässä aakkosjärjestyksessä.

Esimerkkejä

(1,2-dimetyylipropyli) on sivuketju, jossa on kolme hiiliatomiä. Hiiliatomi, joka on sitoutunut perusketjuun on numero 1 ja metyyliiradikaalit ovat sitoutuneet hiiliatomeihin 1 ja 2.

5-(1,2-dimetyylipropyli)-4-etyylidekaanissa on perusketju, johon on liittynyt yksi etyyliiradikaali hiileen numero 4 ja yllä mainittu haarautunut sivuketju on liittynyt hiileen numero 5. Huomaa, ettei nimi ole 4-etyyli-5-(1,2-dimetyylipropyli)dekaani f)-kohdan mukaan, sillä d on aakkosissa ennen e:tä.

Alkaanit, joissa on alkyylihalidisubstituentteja

Nimeämismenetelmä on samanlainen kuin haarautuneiden alkaanien, sillä substituenttien nimet ja sijainnit sijoitetaan samalla tavalla kuin alkyyliradikaalien. Mahdollisia substituentteja ovat::

F, fluori

Cl, kloori

Br, bromi

I, jodi

Esimerkki

4-etyyli-3,3-dikloori-5-(1-kloori-2-metyylipropyli)dekaanissa on perushiiliketju, johon on liittynyt kaksi klooriatomiä sitoutuneena hiiliatomiin numero 3 ja etyyliiradikaali sitoutuneena hiileen numero 4. Haarautunut sivuketju, johon kuuluu 3 hiiliatomiä, on

sitoutunut hiiliatomiin numero 5 ja kloori ja metyyliryhmät ovat sitoutuneet sen hiiliatomeihin numerot 1 ja 2 vastaavasti.

Alkeiden nimeäminen

Alkeet (ja alkadienit, alkatrienit jne.) nimetään seuraavan käytännön mukaisesti:

- Etsitään perusketju. Yleensä se on pisin ketju, mutta tärkeämpää on, että perusketju sisältää mahdollisimman monta kaksoissidosta.
- Perusketjun nimi johdetaan vastaavan haarautumattoman alkaanin nimestä, jossa on yhtä monta hiiltä kuin perusketjussa. Tätä nimeä muutetaan kaksoissidosten lukumäärän mukaan ja päätteeksi tulee eeni, dieeni tai trieni riippuen siitä, onko yhdisteessä yksi, kaksi vai kolme kaksoissidosta. Näin muodostettu perusketjun nimi muodostaa yhdisteen nimen loppuosan.
- Kun perusketju numeroidaan, annetaan kaksoissidoksille mahdollisimman alhaiset paikkanumerot. Jos alhaisimmat numerot voidaan antaa kahdella eri tavalla, annetaan numerot niin, että substituentti, jonka nimi on aakkosissa aiemmin, saa pienimmän numeron.
- Kaksoissidosten sijainnit merkitään ennen perusketjun nimeä ja stereoisomeria merkitään myös näkyviin (katso alapuolella).
- Huomioi sivuketjujen (alkyyli-ryhmät ja substituentit) sijainnit.
- Yhdisteen nimen alkuosan muodostavat sivuketjujen nimet, jotka luetellaan aakkosjärjestyksessä sivuketjun paikkanumeron kera. Jos yhdisteessä on samanlaisia alkyyli-ryhmiä, tämä ilmaistaan moninkertaistavalla etuliitteellä di, tri, tetra jne. ja sijainnit ilmoitetaan yhdessä pilkuilla erotettuina.

lisäys d) Jos kaksi erilaista ryhmää on liittynyt kumpaankin kaksoisidoksen hiiliatomiin, on välttämätöntä merkitä isomeria joko cis/trans tai Z/E. Jos samanlaiset alkyyli-ryhmät ovat sitoutuneet eri hiiliatomeihin, käytetään merkintää cis/trans. Muulloin käytetään Z/E. Jos raskaammat atomit (huom. ei atomiryhmät) ovat samalla puolella kaksoissidosta, on kysymyksessä Z-konfiguraatio, eri puolilla taas E-konfiguraatio.

Esimerkkejä

2,3,5-trimetyyli-2-hekseenissä on 6 hiiliatomiä perushiiliketjussa. Kun nämä hiiliatomit numeroidaan 1-6, metyyli-ryhmät saavat numerot 2, 3 ja 5 ja yhdisteessä on kaksoissidos hiiliatomien 2 ja 3 välillä. Koska kolme samanlaista ryhmää on sitoutunut kaksoisidoksen kahteen hiiliatomiin, ei rakenneisomeriaa esiinny.

2-cis-hekseenissä on kaksoissidos hiiliatomien 2 ja 3 välillä. Kumpaankin näistä on sitoutunut vetyatomi. cis osoittaa, että ne ovat samalla puolella kaksoisidosta.

2-trans-hekseenissä on kaksoissidos hiiliatomien 2 ja 3 välillä. Kumpaankin näistä on sitoutunut vetyatomi. trans osoittaa, että ne ovat kaksoisidoksen vastakkaisilla puolilla.

1,4-cis-heksadienissä on kaksi kaksoissidosta. Rakenneisomeriaa esiintyy vain hiiliatomien 4 ja 5 välillä olevassa kaksoisidoksessa.

2-bromi-1-kloori-1-E,4-cis-heksadienissä on 6 hiiliatomiä perushiiliketjussa.

Hiiliatomien 1 ja 2 välillä on kaksoissidos sekä hiiliatomien 4 ja 5 välillä vastaavasti. Hiiliatomi numero yhteen on kiinnittynyt vetyatomi ja klooriatomi; klooriatomilla on suurempi järjestysluku ja siten suurempi prioriteetti. Hiiliatomiin numero 2 on liittynyt hiiliatomi (pääketjusta) ja bromiatomi; bromiatomilla on suurempi järjestysluku ja siten suurempi prioriteetti. E osoittaa, että bromi- ja klooriatomit (joilla on suurempi prioriteetti) ovat liittyneet hiiliatomien 1 ja 2 välisen kaksoissidoksen vastakkaisille puolille (entgegen). Hiiliatomien 4 ja 5 välisessä kaksoissidoksessa esiintyy cis-isomeria.

2-bromi-1-kloori-1-Z,4-cis-heksadieenissä on samat atomit sitoutuneet pääketjuun kuin yllä olevassa esimerkissä, mutta bromi- ja klooriatomit ovat kaksoissidoksen samalla puolella (zusammen).

Alkyynien nimeäminen

Alkyynit (ja alkadiyynit, alkatriyynit jne.) nimetään seuraavan käytännön mukaisesti:

- a) Etsitään perusketju. Yleensä se on pisin ketju, mutta tärkeämpää on, että perusketju sisältää mahdollisimman monta kolmoissidosta.
- b) Perusketjun nimi johdetaan vastaavan haarautumattoman alkaanin nimestä, jossa on yhtä monta hiiltä kuin perusketjussa. Tätä nimeä muutetaan kolmoissidosten lukumäärän mukaan ja päätteeksi tulee yyini, diyyini tai triyyini riippuen siitä, onko yhdisteessä yksi, kaksi vai kolme kolmoissidosta. Näin muodostettu perusketjun nimi muodostaa yhdisteen nimen loppuosan.
- c) Kun perusketju numeroidaan, annetaan kolmoissidoksille mahdollisimman alhaiset paikkanumerot. Jos alhaisimmat numerot voidaan antaa kahdella eri tavalla, annetaan numerot niin, että substituentti, jonka nimi on aakkosissa aiemmin, saa pienimmän numeron.
- d) Kolmoissidosten sijainnit merkitään ennen perusketjun nimeä.
- e) Huomioi sivuketjujen (alkyyliiradikaalit ja substituentit) sijainnit.
- f) Yhdisteen nimen alkuosan muodostavat sivuketjujen (alkyyliiradikaalit, substituentit) nimet, jotka luetellaan aakkosjärjestyksessä sivuketjun paikkanumeron kera. Jos yhdisteessä on samanlaisia alkyyliiryhmiä, tämä ilmaistaan moninkertaistavalla etuliitteellä di, tri, tetra jne. ja sijainnit ilmoitetaan yhdessä pilkuilla erotettuina.

Esimerkkejä:

1,3-heksadiyynissä on 6 hiiliatomia perushiiliketjussa. Hiiliatomien 1 ja 2 välillä on kolmoissidos sekä hiiliatomien 3 ja 4 välillä vastaavasti.

5-fluori-1-kloori-1,3-heksadiyynissä on rakentunut samalla tavalla kuin yllä on kuvattu, mutta lisäksi klooriatomi on sitoutunut hiileen numero 1 ja fluoriatomi hiileen numero 5. Molemmat korvaavat vetyatomin.

Syklisten yhdisteiden nimeäminen

Sykliset yhdisteet nimetään seuraavan käytännön mukaisesti:

- a) Yhdisteen nimen loppuosa muodostuu renkaan nimestä: syklopropaani, syklobutaaani jne., jos renkaassa on vain yksinkertaisia sidoksia. Syklopropeeni, syklobuteeni jne., jos renkaassa on yksi kaksoissidos.
- b) Kun renkaan hiiliatomit numeroidaan, mahdollinen kaksoissidos liittyy hiiliatomiin numero 1 ja substituentteille annetaan sitten mahdollisimman alhaiset paikkanumerot. Jos mahdollisimman alhaiset paikkanumerot voidaan antaa kahdella eri tavalla, saa substituentti, jonka nimi on aakkosissa aiemmin, pienimmän numeron.
- c) Ennen renkaan nimeä tulee substituenttien nimet aakkosjärjestyksessä paikkanumeroiden kera. Jos yhdisteessä on samanlaisia substituentteja, tämä ilmaistaan moninkertaistavalla etuliitteellä di, tri, tetra jne. ja sijainnit ilmoitetaan yhdessä pilkuilla erotettuina. Jos yhdisteessä ei ole kaksoissidosta ja siinä on vain yksi substituentti, sen sijaintia ei ilmoiteta.
- d) Isomeria merkitään yhdisteen nimen ensimmäiseksi osaksi (cis/trans) ilmaisemaan sijaitsevatko substituentit rengastason ylä- vai alapuolella suhteessa nimessä ensimmäisenä mainittuun substituenttiin.

Esimerkkejä:

cis,trans-1,2,3-trikloorisyklobutaanissa on 4-hiiliatomia sisältävä rengas.

Klooriatomit ovat sitoutuneet kuhunkin hiiliatomeista 1, 2 ja 3. Oletetaan, että hiiliatomiin numero 1 sitoutunut kloori sijaitsee rengastason yläpuolella, jolloin hiiliatomiin numero 2 sitoutunut klooriatomi sijaitsee myös tason yläpuolella, kun taas hiiliatomiin numero 3 sitoutunut kloori sijaitsee tason alapuolella.

1,2-dikloorisyklobuteenissa on kaksoissidos hiiliatomien 1 ja 2 välillä. Kumpaankin näistä on sitoutunut klooriatomi.

Alkoholien nimeäminen

Alkoholit nimetään seuraavan käytännön mukaisesti:

- a) Etsitään perusketju. Tavallisesti se on pisin hiiliketju, mutta tärkeämpää on, että se sisältää mahdollisimman monta hydroksyyliiryhmää.
- b) Perusketjun nimi johdetaan vastaavan haarautumattoman alkaanin nimestä, jossa on yhtä monta hiiltä kuin perusketjussa. Nimen loppuun liitetään oli, dioli tai trioli sen mukaan sisältääkö yhdiste 1, 2 vai 3 hydroksyyliiryhmää. Näin muodostettu perusketjun nimi muodostaa yhdisteen nimen loppuosan.
- c) Perusketju numeroidaan siten, että hydroksyyliiryhmät saavat mahdollisimman alhaiset paikkanumerot. Jos mahdollisimman alhaiset paikkanumerot voidaan antaa kahdella eri tavalla, saa substituentti, jonka nimi on aakkosissa aiemmin, pienimmän numeron.
- d) Hydroksyyliiryhmien sijainnista kertovat numerot merkitään ennen perusketjun nimeä.
- e) Huomioi jäljelle jäävien sivuketjujen sijainnit (katso alapuolella).
- f) Yhdisteen nimen alkuosan muodostavat sivuketjujen nimet, jotka luetellaan aakkosjärjestyksessä sivuketjun paikkanumeron kera. Jos yhdisteessä on samanlaisia sivuketjuja, tämä ilmaistaan moninkertaistavalla etuliitteellä di, tri, tetra jne. ja sijainnit ilmoitetaan yhdessä pilkuilla erotettuina.

lisäys e) Sivuketjuina voivat olla alkyyliradikaalit, fluori, kloori, bromi, jodi, amino ja merkapto.

Esimerkkejä:

1,3-propaanidioli sisältää perusketjun, joka koostuu 3 hiiliatomista. Hydroksyyliiryhmät ovat sitoutuneet hiiliatomeihin 1 ja 3.

2-amino-1,3-propaanidiolissa on aminoryhmä sitoutunut hiiliatomiin numero 2, muuten rakenne on sama kuin 1,3-propaanidiolissa.

Aldehydien nimeäminen

Aldehydit nimetään seuraavan käytännön mukaisesti:

- a) Etsitään perusketju. Tavallisesti se on pisin hiiliketju, mutta tietysti perusketjun tulee sisältää aldehydiryhmä sitoutuneena jompaan kumpaan päähän tai mieluummin vielä molempiin perusketjun päihin.
- b) Perusketjun nimi johdetaan vastaavan haarautumattoman alkaanin nimestä, jossa on yhtä monta hiiltä kuin perusketjussa. Nimen loppuun liitetään aali tai diaali sen mukaan liittyykö aldehydiryhmä vain toiseen päähän vai molempiin päihin perusketjua. Näin muodostettu perusketjun nimi muodostaa yhdisteen nimen loppuosan.
- c) Perusketju numeroidaan siten, että yksittäinen aldehydiryhmä sitoutuu hiiliatomiin numero 1. Jos yhdisteessä on aldehydiryhmä hiiliketjun molemmissa päissä, numerointi suoritetaan siten, että sivuketjut saavat mahdollisimman alhaiset paikkanumerot.
- d) Huomioi jäljelle jäävien sivuketjujen sijainnit (katso alapuolella).
- e) Yhdisteen nimen alkuosan muodostavat jäljelle jäävien sivuketjujen nimet, jotka luetellaan aakkosjärjestyksessä sivuketjun paikkanumeron kera. Jos yhdisteessä on samanlaisia sivuketjuja, tämä ilmaistaan moninkertaistavalla etuliitteellä di, tri, tetra jne. ja sijainnit ilmoitetaan yhdessä pilkuilla erotettuina.

lisäys d) Sivuketjuina voivat olla alkyyliradikaalit, fluori, kloori, bromi, jodi, amino ja merkapto.

Esimerkkejä:

Propanidiaali sisältää perushiiliketjun, joka koostuu 3 hiiliatomista. Aldehydiryhmä on sitoutunut ketjun molempien päiden hiiliatomeihin. Aldehydiryhmiä ei kerrota, koska loppupääte diaali osoittaa, että ne ovat liittyneet perusketjun päihin.

2-aminopropanaali sisältää perushiiliketjun, joka koostuu 3 hiiliatomista.

Aldehydiryhmä on sitoutunut hiiliatomiin numero 1 (c-kohdan mukaisesti) ja hiiliatomiin numero 2 on sitoutunut aminoryhmä.

Ketonien nimeäminen

Ketonit nimetään seuraavan käytännön mukaisesti:

- a) Etsitään perusketju. Tavallisesti se on pisin hiiliketju, mutta tärkeämpää on, että perusketju sisältää mahdollisimman monta ketoryhmää.
- b) Perusketjun nimi johdetaan vastaavan haarautumattoman alkaanin nimestä, jossa on yhtä monta hiiltä kuin perusketjussa. Nimen loppuun liitetään oni, dioni tai trioni sen mukaan sisältääkö yhdiste 1, 2 vai 3 ketoryhmää.
- c) Perusketju numeroidaan siten, että ketoryhmät saavat mahdollisimman alhaiset paikkanumerot. Jos mahdollisimman alhaiset paikkanumerot voidaan antaa kahdella eri tavalla, saa jäljelle jäävistä substituenteista se, jonka nimi on aakkosissa aiemmin, pienimmän numeron.
- d) Ketoryhmien sijainnista kertovat numerot merkitään ennen perusketjun nimeä.
- e) Huomioi jäljelle jäävien sivuketjujen sijainnit (katso alapuolella).
- f) Yhdisteen nimen alkuosan muodostavat jäljelle jäävien sivuketjujen nimet, jotka luetellaan aakkosjärjestyksessä sivuketjun paikkanumeron kera. Jos yhdisteessä on samanlaisia sivuketjuja, tämä ilmaistaan moninkertaistavalla etuliitteellä di, tri, tetra jne. ja sijainnit ilmoitetaan yhdessä pilkuilla erotettuina.

lisäys e) Sivuketjuina voivat olla alkyyliradikaalit, fluori, kloori, bromi, jodi, amino ja merkpto.

Esimerkkejä:

2-pentanoni (ei 4-pentanoni c-kohdan mukaisesti) sisältää perushiiliketjun, joka koostuu 5 hiiliatomista. Ketoryhmä on sitoutunut hiiliatomiin numero 2.

5-kloori-2-pentanoni (ei 1-kloori-4-pentanoni c-kohdan mukaisesti) sisältää perushiiliketjun, joka koostuu 5 hiiliatomista. Ketoryhmä on sitoutunut hiiliatomiin numero 2 ja kloori on sitoutunut hiiliatomiin numero 5.

Organican hakemistot

Kaikki Organican yhdisteet on koottu molekyylihakemistoon, kun taas oppitunnit on koottu oppituntihakemistoon. Nämä hakemistot ovat tallennettujen molekyylien ja oppituntien nimiluetteloita, jotka sisältävät yksittäisten molekyylien ja oppituntien tiedostot. Ne on koottu kovalevyille DOS-hakemistoon, mutta tiedostonimet ovat numeroita ja siten ne eivät ole kovin informatiivisia. On mahdollista vaihtaa hakemistoa työskenneltäessä Organica -ohjelmalla ja on myös mahdollista luoda uusia hakemistoja.

Kun Organica käynnistetään, DOS-työhakemisto, joka sisältää molekyylihakemiston ja oppituntihakemiston, on hakemisto nimeltään 'data'. Tämä hakemisto on Organica.exe 'n sisältämän hakemiston alihakemisto. Jos Organica on esimerkiksi asennettu C-asemaan Organica-hakemistoon, on työhakemisto nimeltään:

C:\ORGANICA\DATA

Jos Organicaa käytetään tietokoneelta, joka on liitetty verkkoon, on mahdollista avata ja tallentaa molekyyliä ja oppitunteja verkon toiseen tietokoneeseen.

Jos työskentelet Organican osiossa 'Kokoa oppitunti', ohjelma antaa sinulle mahdollisuuden luoda uuden hakemiston, jos yrität vaihtaa olemattomaan hakemistoon. Jos esimerkiksi vaihdat hakemistoon

C:\ORGANICA\MOLEKYL

ohjelma kysyy haluatko luoda tämän hakemiston.

'Example' -hakemisto on Organica hakemiston alihakemisto samoin kuin 'Data' -hakemisto. Tämä hakemisto sisältää kaikki tämän Ohje -tiedoston molekyyliesimerkit. Valitse valikoista kohta **Vaihda hakemisto** siirtyäksesi "Example"-hakemistoon. Yleensä se on:

C:\ORGANICA\EXAMPLE

Jos haluat siirtää Organica -ohjelmassa yhden tai useampia oppitunteja toiselle tietokoneelle Windowsin Tiedostonhallinnan tai Windowsin Explorerin avulla, tulee sinun avata DATA-hakemisto. Täältä löydät kahdenlaisia tiedostoja: toinen tyyppi koostuu numerosta ja sitä seuraavasta tarkentimesta 'mol', kun taas toinen tyyppi koostuu numerosta ja sitä seuraavasta tarkentimesta 'lek'. Nämä ovat molekyyli- ja oppituntitiedostoja vastaavasti. Jos haluat nähdä oppituntitiedoston rakenteen, voit avata tiedoston Windowsin Muistiolla tai vastaavalla tekstieditoriohjelmalla. Oppitunti- ja molekyyli-tiedostot alkavat rivillä 'Organica ver 1.0', jota seuraa 'NIMI:'. Näiden jälkeen 3. rivillä näet oppitunnin tai molekyylin nimen.

Esimerkki:

Organica ver 1.0
NIMI:
2-propanoli

Jos haluat kopioida oppitunnin, ei ole tarpeellista kopioida myös molekyylitiedostoja, sillä ne sisältyvät oppituntitiedostoon.

Voit avata oppitunnin myös 'Kokoa oppitunti' osiossa ja vaihtaa sen jälkeen levykeaseman hakemistoon. Tässä tapauksessa sinun tulee Organican avulla tallentaa sekä hakemistoon, josta siirryit (työhakemisto), että levykkeen hakemistoon, johon siirryit.

Karboksyylihappojen nimeäminen

Karboksyylihapot nimetään seuraavan käytännön mukaisesti:

- a) Etsitään perusketju. Tavallisesti se on pisin hiiliketju, mutta tietysti perusketjun tulee sisältää karboksyyliryhmä sitoutuneena jompaan kumpaan päähän tai vielä mieluummin molempiin päihin perusketjussa.
- b) Perusketjun nimi johdetaan vastaavan haarautumattoman alkaanin nimestä, jossa on yhtä monta hiiltä kuin perusketjussa. Nimen loppuun liitetään happo tai dihapo sen mukaan liittyykö karboksyyliryhmä vain toiseen päähän vai molempiin päihin perusketjua. Näin muodostettu perusketjun nimi muodostaa yhdisteen nimen loppuosan.
- c) Perusketju numeroidaan siten, että yksittäinen karboksyyliryhmä sitoutuu hiiliatomiin numero 1. Jos yhdisteessä on karboksyyliryhmä hiiliketjun molemmissa päissä, numerointi suoritetaan siten, että sivuketjut saavat mahdollisimman alhaiset paikkanumerot.
- d) Huomioi jäljelle jäävien sivuketjujen sijainnit (katso alapuolella).
- e) Yhdisteen nimen alkuosan muodostavat jäljelle jäävien sivuketjujen nimet, jotka luetellaan aakkosjärjestyksessä sivuketjun paikkanumeron kera. Jos yhdisteessä on samanlaisia sivuketjuja, tämä ilmaistaan moninkertaistavalla etuliitteellä di, tri, tetra jne. ja sijainnit ilmoitetaan yhdessä pilkuilla erotettuina.

lisäys d) Sivuketjuina voivat olla alkyyliradikaalit, fluori, kloori, bromi, jodi, amino ja merkaptto.

Esimerkkejä

Propaanidihappo sisältää perushiiliketjun, joka koostuu 3 hiiliatomista.

Karboksyyliryhmät ovat sitoutuneet hiiliatomeihin numerot 1 ja 3. Karboksyyliryhmien sijaintia ei ilmoiteta, sillä liite dihapo osoittaa, että ne ovat sitoutuneet päähiiliketjun kumpaankin päähän.

2-aminopropaanidihappo sisältää perushiiliketjun, joka koostuu 3 hiiliatomista.

Hiiliatomiin numero 1 on sitoutunut karboksyyliryhmä (c-kohdan mukaisesti) ja hiiliatomiin numero 2 on sitoutunut aminoryhmä.

Eettereiden nimeäminen

Eetterit, R-O-R', nimetään kirjoittamalla radikaalien R ja R' nimet aakkosjärjestyksessä, joita seuraa pääte eetteri. Jos nämä kaksi radikaalia ovat samanlaisia, nimi muodostetaan seuraavasti: di, jota seuraa radikaalien nimi ja pääte eetteri.

Esimerkkejä:

Etyylimetyylieetteri (ei metyylietyylieetteri) koostuu happiatomista ja siihen sitoutuneista etyyli- ja metyyli-radikaaleista.

Dietyylieetteri koostuu happiatomista ja siihen sitoutuneesta kahdesta etyyli-radikaalista.

Amiinien nimeäminen

Amiinit, jotka sisältävät typpiä, johon on sitoutunut vetyatomeja ja /tai 1, 2 tai 3 alkyyliradikaalia, nimetään seuraavan käytännön mukaisesti:

Jos typpiä on sitoutunut vain yksi alkyyliradikaali, se on muotoa NH_2R , jolloin kirjoitetaan ensin ryhmän R nimi ja sen jälkeen pääte amiini.

Jos typpiä on sitoutunut useampia alkyyliradikaaleja, kirjoitetaan alkyyliradikaalien nimet aakkosjärjestyksessä ja lopuksi pääte amiini. Jos samanlaisia alkyyliradikaaleja on kaksi tai kolme, käytetään moninkertaistavia etuliitteitä di tai tri.

Esimerkkejä:

Propyyliamiini koostuu typpiä ja siihen sitoutuneesta propyyli- ja kahdesta vetyatomista.

Dipropyyliamiini koostuu typpiä ja siihen sitoutuneista kahdesta propyyli- ja vetyatomista.

Etyylimetyylipropyyliamiini (ei metyylietyylipropyyliamiini) koostuu typpiä ja siihen sitoutuneista yhdestä etyyliradikaalista, yhdestä metyyli- ja yhdestä propyyli- ja vetyatomista.

Estereiden nimeäminen

Estereitä voidaan muodollisesti valmistaa korvaamalla karboksyylihapon karboksyyliyryhmän vetyatomi alkyyliradikaalilla. Estereiden nimet muodostetaan sitten seuraavasti: alkyyliradikaalin nimi, jota seuraa karboksyylihapon nimi, jossa happo on korvattu päätteellä aatti.

Esimerkkejä:

Metyylipropanaatin voidaan muodollisesti katsoa johtuvan propaanihaposta, jossa hapon vetyatomi on korvattu metyyli­radikaalilla.

Propyyli­metanaatin voidaan muodollisesti katsoa johtuvan metaanihaposta, jossa hapon vetyatomi on korvattu propyyli­radikaalilla.

Aromaattisten yhdisteiden nimeäminen

Aromaattiset yhdisteet, jotka koostuvat bentseenimolekyylistä, jossa yksi tai useampi vetyatomi on korvautunut substituentilla, nimetään seuraavan käytännön mukaisesti:

- a) Yhdisteen nimen loppuosan täytyy olla bentseeni.
- b) Kun bentseenirenkaan hiiliatomit numeroidaan, substituentteille annetaan mahdollisimman alhaiset paikkanumerot. Jos mahdollisimman alhaiset paikkanumerot voidaan antaa kahdella eri tavalla, saa substituentteista se, jonka nimi on aakkosissa aiemmin, pienimmän numeron.
- c) Ennen bentseeniä luetellaan substituenttien nimet aakkosjärjestyksessä paikkanumeroiden kera. Jos yhdisteessä on useita samanlaisia substituentteja, tämä ilmaistaan moninkertaistavalla etuliitteellä di, tri, tetra jne. ja sijainnit ilmoitetaan yhdessä pilkuilla erotettuina. Jos substituentteja on vain yksi, sen paikkaa ei ilmoiteta.

Esimerkkejä

1-etyyli-2-kloori-4-metyylibentseeni (ei 4-etyyli-3-kloori-1-metyylibentseeni, sillä 1,2,4 ovat pienemmät kuin 1,3,4) koostuu bentseenirenkaasta, jonka hiiliatomit on numeroitu 1:stä 6:een siten, että etyyli- ja kloori-atomit on sitoutunut hiileen numero 1, klooriatomi hiileen numero 2 ja metyyli-atomit hiileen numero 4.

1-kloori-2-metyylibentseeni (ei 2-kloori-1-metyylibentseeni b-kohdan mukaisesti) koostuu bentseenirenkaasta, jonka hiiliatomit on numeroitu 1:stä 6:een siten, että klooriatomi on sitoutunut hiileen numero 1 ja metyyli-atomit hiileen numero 2.

CFC-kaasujen nimeäminen

CFC-kaasut voidaan nimetä etuliitteellä CFC- jota seuraa 2- tai 3-numeroinen luku. Tämä numero, XYZ, muodostuu seuraavasti:

X on molekyyllissä olevien hiiliatomien lukumäärä miinus 1. Luku jätetään pois, jos se on nolla.

Y on molekyyllissä olevien vetyatomien lukumäärä plus 1.

Z on molekyyllissä olevien fluoriatomien lukumäärä.

Esimerkkejä:

CHClF_2 saa nimen CFC-22, jossa $X=1-1=0$, $Y=1+1=2$ ja $Z=2$. Huomaa, että luku on kaksinumeroinen, sillä $X=0$.

$\text{C}_2\text{H}_2\text{ClF}_3$ saa nimen CFC-133, jossa $X=2-1=1$, $Y=2+1=3$ ja $Z=3$.

Useamman kuin yhden funktionaalisen ryhmän sisältävien molekyylien nimeäminen

Jotta useamman kuin yhden funktionaalisen ryhmän sisältävien molekyylien nimeäminen on mahdollista, on tarpeellista tietää funktionaalisten ryhmien tärkeysjärjestys(prioriteetti), katso alapuolella olevaa taulukkoa. Kun molekyylissä on useampi kuin yksi funktionaalinen ryhmä, ilmaistaan yhdisteen nimen loppuliitteellä se funktionaalinen ryhmä, joka on taulukossa ylimpänä (suurin prioriteetti). Jäljelle jääville funktionaalisille ryhmille käytetään nimessä etuliitteitä.

Funktionaalinen ryhmä	Kaava	Etuliite	Loppuliite
karboksyylihappo	-COOH	-	happo
esteri	-COOR	-	alkyyli... aatti
aldehydi	-CHO	formyyli	aali
ketoni	R-CO-R'	okso	oni
alkoholi	-OH	hydroksi	oli
amiini	-NH ₂	amino	amiini
tioli	-SH	merkaptto	tioli
eetteri	R-O-R'	alkoksi	alkyyli-alkyyli'-eetteri
alkeeni	-C=C-	alkenylyli	eeni
alkyyini	-C≡C-	alkynyyli	yyini
alkaani	-C-C-	alkyyli	aani

Seuraavia ryhmiä ei voi käyttää nimessä loppuliitteenä:

-F	fluori	-
-Cl	kloori	-
-Br	bromi	-
-I	jodi	-

Yhdisteet, joissa on useampi kuin yksi funktionaalinen ryhmä nimetään seuraavan käytännön mukaisesti:

- Määritä tärkein ryhmä (suurin prioriteetti taulukossa). Vain yksi ryhmä voi olla nimen loppuliitteenä.
- Etsi perusketju. Tavallisesti tämä on pisin hiiliketju, mutta tärkeämpää on, että perusketju sisältää 1.) mahdollisimman monta funktionaalista ryhmää, 2.) mahdollisimman monta kaksoissidosta.
- Perusketjun nimi johdetaan vastaavan haarautumattoman alkaanin nimestä, jossa on yhtä monta hiiltä kuin perusketjussa. Tähän nimeen liitetään taulukosta loppuliite. Jos funktionaalinen ryhmä esiintyy yhdisteessä useammin kuin kerran, tämä osoitetaan moninkertaistavalla etuliitteellä di, tri, tetra jne.
- Perusketjun nimi muutetaan kaksoissidosten (aani korvataan eenillä) ja kolmoissidosten (aani korvataan yynillä) mukaan. Näin muodostettu perusketjun

- nimi muodostaa nimen loppuosan.
- e) Kun perusketju numeroidaan, tärkein funktionaalinen ryhmä saa mahdollisimman alhaisen paikkanumeron/t. Jos mahdollisimman alhaiset paikkanumerot voidaan antaa kahdella eri tavalla, saa jäljelle jäävistä substitueista se, jonka nimi on aakkosissa aiemmin, pienimmän numeron. Jos funktionaalinen ryhmä esiintyy useammin kuin kerran yhdisteessä, sen paikat esitetään yhdessä pilkuilla erotettuna.
 - f) Tärkeimmän funktionaalisen ryhmän paikka merkitään ennen perusketjun nimeä, jos yhdisteessä ei ole kaksois- eikä kolmoissidoksia. Muussa tapauksessa se merkitään ennen perusketjun loppuliitettä ja kaksois- ja kolmoissidosten sijainnit samoin kuin isomeria merkitään ennen perusketjun nimeä.
 - g) Huomioi jäljelle jäävien sivuketjujen sijainnit.
 - h) Yhdisteen nimen ensimmäiseksi osaksi merkitään jäljelle jäävien funktionaalisten ryhmien etuliitenimet aakkosjärjestyksessä paikkamerkintöjen kera. Jos yhdisteessä on samanlaisia funktionaalisia ryhmiä, tämä ilmaistaan moninkertaistavalla etuliitteellä di, tri, tetra jne. ja paikat ilmoitetaan yhdessä pilkuilla erotettuina.

Esimerkkejä

2-hydroksi-5-kloori-3-cis-hekseenihappo. Perusketjussa on 6 hiiliatomia. Tärkein ryhmä on happo, koska sillä on suurin prioriteetti. Jäljelle jääville funktionaalisille ryhmille käytetään etuliitteitä. Perusketju numeroidaan siten, että happoryhmän hiiliatomi saa numeron 1, mutta tätä numeroa ei merkitä näkyviin. Heksaani on muutettu hekseeniksi, koska yhdisteessä on kaksoissidos.

1-hydroksi-5-merkaptio-3-heksyyni-2-oni. Perusketjussa on 6 hiiliatomia. Tärkein ryhmä on ketoni, josta seuraa pääte oni. Jäljelle jääville funktionaalisille ryhmille käytetään etuliitteitä. Perusketju numeroidaan siten, että oksoryhmän hiiliatomi saa mahdollisimman pienen sijaintimerkinnän. Koska yhdisteessä on kolmoissidos, jonka sijainti täytyy ilmoittaa, okso-ryhmän sijainti merkitään vasta ennen oni-päätettä.

Nimeämis -osion Käyttäjän valinnat -valikko



Käyttäjän valinnat -valikossa voit valita **asetukset**, jossa määritetään kuinka oppitunti kootaan. Jos avaat aikaisemmin valmistetun oppitunnin, asetukset jätetään huomiotta.

Zoomaus ja kierto antaa mahdollisuuden säätää kuinka nopeasti kiertäminen ja zoomaus tapahtuvat, kun käytät kolmiulotteista (3D) esitystä.

Valikon kohdasta **hakemisto** voit määrittää polun hakemistoon, josta avaat oppituntisi. Yleensä Organica käyttää hakemistoa, jota kutsutaan 'dataksi' ja joka sijaitsee ohjelman omassa hakemistossa.

Nimeämis -osion Ohjevalikko

Ohje
Ohje
✓ Painikkeiden selitystekstit
Ohjelmasta...

Ohjevalikko mahdollistaa Organican ohjesivujen avaamisen. Painikkeiden selitystekstit voidaan ottaa käyttöön, jolloin ne ilmestyvät ruudulle painikkeen alapuolelle, tai poistaa käytöstä.

Ohjelmasta... kertoo sinulle Organica -ohjelmasta.

Kokoa oppitunti

Valitse yhdistetyypit:

<input type="checkbox"/> Alkaanit	<input type="checkbox"/> Karboksyylihapot
<input type="checkbox"/> Alkeenit	<input type="checkbox"/> Eetterit
<input type="checkbox"/> Alkyynit	<input type="checkbox"/> Amiinit
<input type="checkbox"/> Sykliset yhdisteet	<input type="checkbox"/> Esterit
<input type="checkbox"/> Alkoholit	<input type="checkbox"/> Aromaattiset yhdisteet
<input type="checkbox"/> Aldehydit	<input type="checkbox"/> CFC:t
<input type="checkbox"/> Ketonit	<input type="checkbox"/> Useampi kuin yksi funktionaalinen ryhmä

OK

Aloituspöytä

Kun käynnistät Organican, saat ensimmäiseksi eteesi Aloitusnäytön. Tältä näytöltä valitset sen osion Organicasta, jota haluat käyttää, ja tälle näytölle palaat, kun valitset **Paluu** Tiedosto-valikosta. Tältä näytöltä voit myös lopettaa ohjelman käytön. Aloitusnäytöllä on Tiedosto-valikko ja Ohje-valikko.

Tiedosto-valikko:

Tiedosto
Harjoittele nimeämistä...
Muodosta molekyylijä...
Kokoa oppitunti...
Lopetus

Harjoittele nimeämistä avaa ohjelman nimeämisosion. Kun haluat käydä läpi aikaisemmin kokoamiasi tai ohjelman kokoamia oppitunteja, sinun tulee käyttää tätä osiota.

Muodosta molekyylijä avaa ohjelman osion, jossa voit muodostaa molekyylijä. Voit tallentaa ne käyttäaksesi niitä myöhemmin oppitunteihin tai vain tutkiaksesi niitä kolmiulotteisesti (3D).

Kokoa oppitunti on ohjelman osio, jossa voit koota oppitunteja käyttäaksesi niitä nimeämisosiossa.

Jos haluat poistua ohjelmasta, valitset **Lopeta**.

Ohje-valikko:

Ohje
Ohje
✓ Painikkeiden selitystekstit
Ohjelmasta...

Ohje-valikko mahdollistaa Organican ohjesivujen lukemisen.

Painikkeiden selitystekstit voidaan ottaa käyttöön tai poistaa käytöstä napauttamalla valikkokomentoa **Painikkeiden selitystekstit**. Tämä komento lisää tai poistaa tarkistusmerkin ko. kohdan eteen. Kun tarkistusmerkki on valikossa, Organica näyttää painikkeiden selitystekstit.

Ohjelmasta -komento antaa tietoja Organica -ohjelman ohjelmoijista, suunnittelijoista ja käsikirjoittajista.

Värit / Tekstit

Kun molekyyli on ruudulla kaksiulotteisena (2D), voit valita näyttääkö ohjelma atomit värillisinä ympyröinä vai ympyröinä, joissa on atomin symboli.

3D vai 2D

Tämä painike vaihtaa molekyylin kolmiulotteisen (3D) ja kaksiulotteisen (2D) esitystavan välillä. Kun valitset 3D-esitystavan, voit käyttää kiertopainikkeita ja zoomauspainikkeita molekyylin liikuttamiseksi.

Kiertopainikkeet

Näitä painikkeita käytetään ruudulla olevan molekyylin kiertämiseen kolmiulotteisessa (3D) esitystavassa.

Zoomauspainikkeet

Nämä painikkeet mahdollistavat molekyylin lähentämisen ja loitontamisen ruudulla. 1:1 -painike palauttaa molekyylin alkuperäiseen kokoonsa.

Näytä nimi

Kun napautat tätä painiketta, ohjelma näyttää työalueella olevan molekyylin oikean nimen (se on nimi, joka molekyytille on annettu muodostettaessa se). Jos käytät tätä mahdollisuutta, et saa pistettä ruudulla olevasta molekyylistä.

Työalue

Tällä alueella molekyylit esitetään. Voit valita kaksi (2D)- tai kolmiulotteisen (3D) esitystavan. Kaksiulotteisessa esitystavassa voit lisäksi valita värilliset atomit tai symbolein varustetut atomit.

Nimikenttä

Tähän kenttään sinun tulee kirjoittaa kyseessä olevan yhdisteen nimi. Kun olet valmis, painat ENTER.

Selitystekstit ovat keltaisissa laatikoissa olevia painikkeiden toiminnasta kertovia tekstejä, jotka tulevat näkyviin, kun hiiren osoitin viedään noin sekunniksi painikkeen päälle. Esimerkiksi:

Kopioi valitut yhdisteet oppituntiin

Tämän keskusteluikkunan kautta voit säädellä minkälaisia orgaanisia molekyyliä Organica -ohjelma muodostaa.

Asetukset

Oppituntiin kuuluvien yhdisteiden lukumäärä 1-99

Yrityksiä yhdistettä kohti 1-5

Taso 1-10

Valittavissa olevat substituentit:

- Alkyyliyhdykset
- Halogeenit
- Aminoryhmät
- Merkaptoryhmät

Tätä keskusteluikkunaa käytetään säädeltäessä Organican zoomaus- ja kiertonopeuksia.



The image shows a dialog box titled "Zoomaus ja kierto" (Zoom and rotation). It contains two sliders and an "OK" button. The first slider is labeled "Zoomauskerroin" (Zoom factor) with a range of "1-10" and a current value of "3". The second slider is labeled "Kiertokulma" (Rotation angle) with a range of "1-180" and a current value of "10".

Parameter	Range	Current Value
Zoomauskerroin	1-10	3
Kiertokulma	1-180	10

Hakemistopolku

Polku näyttää hakemiston sijainnin MS-DOS:ssa. Tällainen polku alkaa kovalevyaseman tunnuksella, jota seuraa polkurakenne käytettävään hakemistoon asti. On mahdollista, että hakemistopolku viittaa myös muualla verkossa olevaan hakemistoon.

Värit / Tekstit

Kun molekyyli on ruudulla kaksiulotteisena (2D), voit valita näyttääkö ohjelma atomit värillisinä ympyröinä vai ympyröinä, joissa on atomin symboli.

3D vai 2D

Tämä painike vaihtaa kolmiulotteisen (3D) ja kaksiulotteisen (2D) esitystavan välillä. Kun valitset 3D-esitystavan, voit käyttää kiertopainikkeita ja zoomauspainikkeita molekyylin liikuttamiseksi.

Kiertopainikkeet

Näitä painikkeita käytetään ruudulla olevan molekyylin kiertämiseen kolmiulotteisessa (3D) esitystavassa.

Zoomauspainikkeet

Nämä painikkeet mahdollistavat molekyylin lähentämisen ja loitontamisen. 1:1 -painike palauttaa molekyylin alkuperäiseen kokoonsa.

Järjestä -painike

Tämä painike järjestää atomit 2D-esitystavassa siten, että ne näkyvät oikealla tavalla. Tämä tarkoittaa, että ohjelma sijoittaa ne samalla tavalla kuin ne ovat nimeämisosiossa. Tämä painike ei muuta molekyylin rakennetta.

Lisää vetyatomit

Tämä painike täydentää molekyyliin puuttuvat vetyatomit.

Sidospainikkeet

Näitä painikkeita käytetään valittaessa työalueelle lisättävät sidostyyppit. Valitse ensin sidostyyppi, jonka haluat lisätä kahden atomin välille. Sijoita sitten hiiren osoittimen kärki atomin numero 1 päälle. Pidä hiiren vasen painike alhaalla ja raahaa hiiren osoitin atomin numero 2 päälle. Lopulta vapautat hiiren painikkeen ja ohjelma lisää sidoksen. Huomaa, että atomeilla tulee olla käyttämätöntä sitomiskapasiteettia (siitä on osoituksena atomin ympärillä oleva keltainen ympyrä), jotta sidos voidaan lisätä. Vetyatomiin ei ole esimerkiksi mahdollista liittää kaksoissidosta.

Atomipainikkeet

Näitä painikkeita käytetään valittaessa työalueelle sijoitettavat atomit. Valitse ensin lisättävä atomi ja napauta sitten hiiren vasenta painiketta työalueella. Jos haluat, voit napauttaa hiiren painiketta useita kertoja sijoittaaksesi useita samanlaisia atomeja ennen kuin vaihdat toisenlaisiin atomityyppeihin.

Nimi	Symboli	Sidoksia	Väri
Hiili	C	4	harmaa
Typpi	N	3	sininen
Happi	O	2	punainen
Rikki	S	2	keltainen
Bromi	Br	1	ruskea
Kloori	Cl	1	tummanvihreä
Fluori	F	1	vaaleanvihreä
Jodi	I	1	lila

Nimikenttä

Tähän kirjoitat nimen työalueella muodostamallesi molekyylille. Sen jälkeen molekyyli voidaan tallentaa valikosta Tiedosto/Tallenna. Annettua nimeä käytetään sitten myös nimeämisosiossa oikeana vastauksena.

Työalue

Tämän alueen esitystapa voidaan valita kaksiulotteiseksi (2D) tai kolmiulotteiseksi (3D).
Molekyylejä voi muokata ruudulla vain 2D-tilassa.

Muodostamisosion Tiedostovalikko

Tiedosto	
Uusi molekyyli	
Hae molekyyli...	
Tallenna molekyyli	
Poista molekyyli	
<hr/>	
Tulosta molekyyli	
Kirjoittimen asetukset...	
<hr/>	
Paluu	

Uusi molekyyli tyhjentää työalueen uuden molekyylin muodostamista varten. Jos työalueella olevaa molekyyliä ei ole tallennettu, ohjelma varoittaa sinua siitä ja voit perua komennon.

Hae molekyyli valinnalla voit hakea hakemistossa olevia molekyyliä. Jos työalueella on molekyyli, jota ei ole tallennettu, voit tallentaa sen ensin.

Tallenna molekyyli tallentaa työalueella olevan molekyylin hakemistoon nimikentässä olevalla nimellä.

Poista molekyyli poistaa työalueella olevan molekyylin hakemistosta. Jos haluat poistaa tallennetun molekyylin, valitset ensin **Hae molekyyli** ja sen jälkeen **Poista molekyyli**.

Tulosta molekyyli ja **Kirjoittimen asetukset** mahdollistavat työalueella olevan molekyylin tulostamisen.

Paluu palauttaa sinut takaisin aloitusnäytölle.

Muodostamisosion Käyttäjän valinnat -valikko



Näiden kahden kohdan avulla voit muuttaa kolmiulotteisen esitystavan zoomaus- ja kiertoarvoja ja hakupolkua hakemistoon, jonne molekyylit tallennetaan ja josta ne haetaan.

Muodostamisosion Ohjevalikko

Ohje
Ohje
✓ Painikkeiden selitystekstit
Ohjelmasta...

Ohjevalikon kautta pääset Organican ohjesivuille.

Lisäksi voit valita näkyvätkö painikkeiden selitystekstit ruudulla vai eivät.

Ohjelmasta... valinta kertoo sinulle Organica -ohjelmasta.

Tätä painiketta napauttamalla ohjelma luo yhdisteen. Muodostettava yhdiste rakennetaan käyttäjän valitsemista orgaanisista yhdisteryhmistä ja Käyttäjän valinnat -valikon määritysten mukaisesti. Kun yhdiste on muodostettu, sen nimi ilmestyy painikkeen vieressä olevaan nimikenttään.

Tämän nuolen napautus siirtää muodostetun yhdisteen hakemistoon. Jos yhdistettä ei ole muodostettu, nuolen napauttamisesta ei seuraa mitään.

Tämän nuolen napauttaminen kopioi valitut yhdisteet hakemistosta oppituntiin.
Yhdisteet valitaan luettelosta napauttamalla.

Tämän nuolen napauttaminen poistaa valitut yhdisteet hakemistosta. Yhdisteet valitaan luettelosta napauttamalla.

Tämän nuolen napauttaminen poistaa valitut yhdisteet oppitunnista. Yhdisteet valitaan oppitunnista napauttamalla niitä oppitunti-ikkunassa.

Tätä et voi napauttaa. Se kuvaa vain kahden poistonuolen toimintaa. Huomioi, että poistaessasi molekyylejä hakemistosta, mitään peruutustoimintoa ei ole käytössä.

Kokoa oppitunti -osion Tiedostovalikko

Tiedosto
Uusi oppitunti...
Avaa oppitunti...
Tallenna oppitunti...
Poista oppitunti...
Paluu

Tässä valikossa on komentoja oppituntien tallentamiseksi ja avaamiseksi.

Uusi oppitunti tyhjentää oppitunti-ikkunan uutta oppituntia varten. Jos ikkunassa olevaa oppituntia ei ole tallennettu, Organica varoittaa sinua siitä ja voit tallentaa oppitunnin.

Avaa oppitunti tuo ruudulle keskusteluikkunan, jonka kautta voit avata aiemmin kootun oppitunnin. Näin voit halutessasi muuttaa aiemmin koottuja oppitunteja.

Tallenna oppitunti tallentaa oppitunti-ikkunassa olevan oppitunnin. Kun oppitunti tallennetaan, ohjelma pyytää sinua nimeämään sen ja tämä nimi näkyy, kun avaat oppitunnin myöhemmin joko Organican nimeämisosiossa tai kokoa oppitunti -osiossa.

Poista oppitunti poistaa oppitunti-ikkunassa olevan oppitunnin. Jos haluat poistaa hakemistossa olevan oppitunnin, valitse ensin **Avaa oppitunti** ja sen jälkeen **Poista oppitunti**.

Paluu palauttaa sinut Aloituspöytä. Jos et ole tallentanut oppitunti-ikkunassa olevaa oppituntia ja sen sisältö on muuttunut, ohjelma kehoittaa sinua tallentamaan sen. Muussa tapauksessa oppituntia ei tallenneta ja palaat aloituspöydälle.

Huomaa, että Organica tallentaa oppitunnin kaikki yhdisteet samaan tiedostoon kovalevyille. Tämä tarkoittaa sitä, että jos haluat siirtää oppitunteja esimerkiksi levyltä toiselle, siirrä vain oppituntitiedostot Windowsin Tiedostonhallinnan tai Explorerin avulla. Ei tarvitse siis siirtää yksittäisiä molekyyli-tiedostoja, vaikka ne kuuluvatkin oppituntiin.

Kokoa oppitunti -osion Käyttäjän valinnat

Käyttäjän valinnat
Asetukset...
Yhdistetyypit...
Hakemisto...

Tästä valikosta on mahdollista muuttaa oppitunteihin liittyviä käyttäjän valintoja

Asetukset:

Asetukset avaa ruudulle Asetukset-keskusteluikkunan. Tämä keskusteluikkuna esiintyy myös yhdisteiden muodostamisen nimeämisosiossa asetusten yhteydessä.

Kokoa oppitunti-osion muodostamistoiminnossa yhdisteiden lukumäärä kussakin oppitunnissa jätetään huomioimatta. Nimeämisosiossa käyttäjän tulee valita nimeämisyriyten lukumäärä per yhdiste. Taso ja Mahdolliset substituentit koskevat vain oppituntiosion muodostamistoimintoa.

Orgaanisten yhdisteiden tyypit:

Kun Kokoa oppitunti-osiossa ensimmäisen kerran napautat Muodosta-painiketta, tulee sinun valita muodostettavien orgaanisten yhdisteiden tyypit. Kun napautat painiketta uudestaan, ohjelma käyttää samoja yhdistetyyppejä, jotka valitsit alussa. Jos haluat vaihtaa muodostettavien yhdisteiden tyyppieä, valitset **orgaanisten yhdisteiden tyypit**.

Hakemisto:

Hakemisto, johon oppitunnit on tallennettu ja mistä ne avataan, määritellään hakemistopolun avulla. Tätä samaa polkua käytetään valittaessa, mitkä yhdisteet ovat käytettävissä hakemistoikkunassa. Jos haluat vaihtaa hakemistoa, tulee sinun päättää mihin oppitunti tallennetaan. Voit tallentaa oppitunnin vanhaan hakemistoon (se on hakemisto, josta olet juuri poistumassa) tai uuteen hakemistoon (se on hakemisto, johon haluat siirtyä). Voit myös tallentaa oppitunnin molempiin hakemistoihin.

Vaihda hakemistoa

Valitse mihin hakemistoon oppitunti tallennetaan

Tallenna:

Uuteen hakemistoon

Vanhaan hakemistoon

OK

Peruuta hakemiston vaihto

Kun yhdiste on tallennettu vanhaan hakemistoon, sinua pyydetään määrittämään polku uuteen hakemistoon.

Kokoa oppitunti -osion Ohje-valikko

Ohje
Ohje
✓ Painikkeiden selitystekstit
Ohjelmasta...

Ohje-valikon kautta pääset Organican ohjesivuille.

Lisäksi voit säätää näkyvätkö Painikkeiden selitystekstit ruudulla vai pidetäänkö ne piilossa.

Ohjelmasta... kertoo Organicasta.

Hakemistoalue

Tässä ikkunassa näkyvät valitussa hakemistossa olevat yhdisteet. Ne ovat aakkosjärjestyksessä.

Oppituntialue

Tässä näkyvät oppitunnin sisältämät yhdisteet. Yhdisteet esiintyvät nimeämisosiossa myös samassa järjestyksessä. Sama yhdiste saattaa esiintyä useammankin kerran.

Nimikenttää käytetään muodostettujen yhdisteiden nimien esittämiseen.

Yleisiä ohjeita orgaanisten yhdisteiden nimeämiseksi:

(Katso ensin kohtaa alkaanit.)

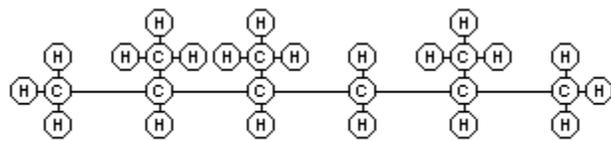
Orgaanisten yhdisteiden nimien voidaan katsoa koostuvan seuraavista osista:

- a) stereoisomeriaa kuvaavat lyhenteet, jos niitä on (cis/trans/Z/E)
- b) paikkanumerot
- c) teksti (kaikki, mikä koostuu kirjaimista, paitsi stereoisomeriaa kuvaavat lyhenteet)

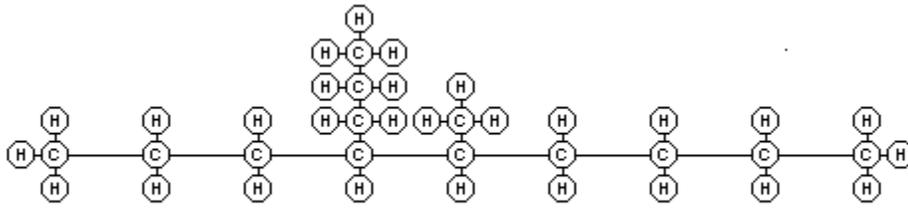
Orgaanisten yhdisteiden nimeämistä koskevat seuraavat säännöt:

- a) paikkanumerot tulevat aina ennen tekstiä, johon ne kuuluvat
- b) paikkanumerot erotetaan toisistaan pilkuilla ja tekstistä yhdysviivalla ja ne kirjoitetaan numerojärjestyksessä
- c) tekstissä ei ole koskaan yhdysviivaa
- d) myöskään väliä ei saa käyttää
- e) stereoisomeriaa kuvaava lyhenne kirjoitetaan alifaattisille yhdisteille heti siihen kuuluvan paikkanumeron jälkeen ja erotetaan siitä yhdysviivalla. Paikkanumeroa ja stereoisomeriaa kuvaavaa lyhennettä voidaan pitää yhtenä paikkanumerona esim. 1-cis
- f) syklisille yhdisteille stereoisomeriaa kuvaavat lyhenteet kirjoitetaan nimen alkuun, erotetaan toisistaan pilkuilla ja lopetetaan yhdysviivaan
- g) haaroittuneen sivuketjun nimi kirjoitetaan sulkeisiin (substituoitu alkyyliradikaali).

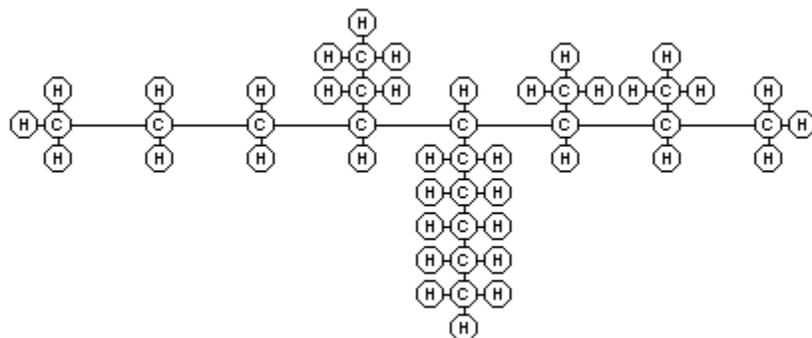
Paikkanumeroita käytetään vain, kun se on tarpeellista. Siten paikkanumero 1 jätetään pois etanolista (ei 1-etanoli) ja klooribentseenistä (ei 1-klooribentseeni). Myöskään ei ole tarpeellista ilmoittaa kolmoissidosten paikkaa heksatriyynissä (ei 1,3,5-heksatriyyni).



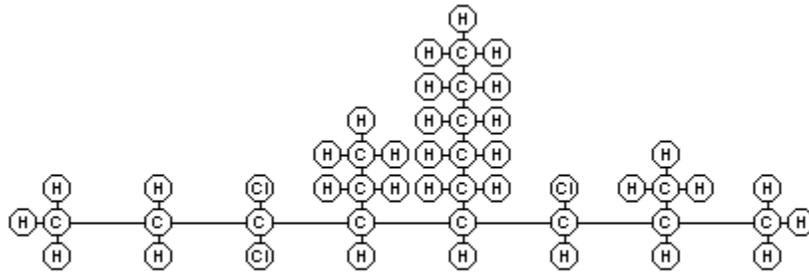
2,3,5-trimetyyliheksaani



5-metyyli-4-propyylinonaani

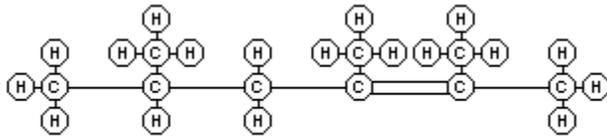


5-(1,2-dimetyylipropyli)-4-etyylidekaani

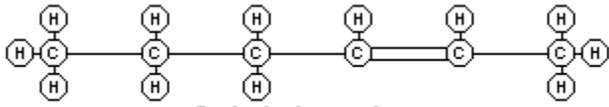


4-etyyli-3,3-dikloori-5-(1-kloori-2-metyylipropyli)dekaani

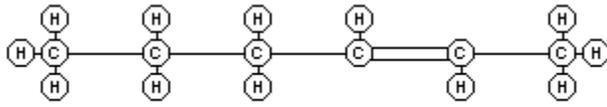




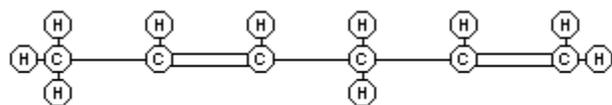
2,3,5-trimetyyli-2-hekseeni



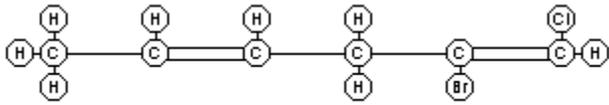
2-cis-hekseeni



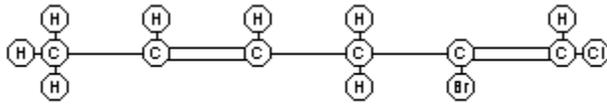
2-trans-hekseeni



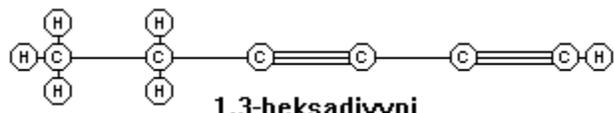
1,4-cis-heksadieeni



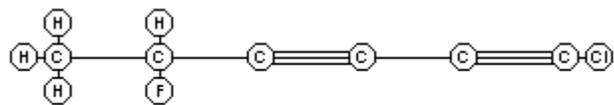
2-bromi-1-kloori-1-e,4-cis-heksadieeni



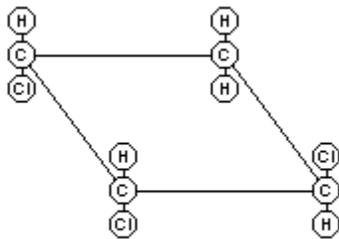
2-bromi-1-kloori-1-z,4-cis-heksadieeni



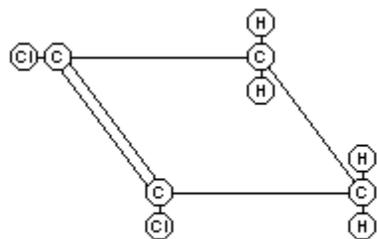
1,3-heksadiyyni



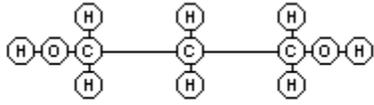
5-fluori-1-kloori-1,3-heksadiyyni



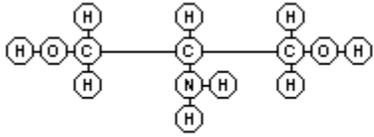
cis,trans-1,2,3-trikloorisyklobutaani



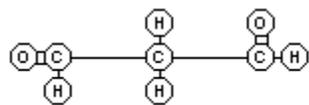
1,2-dikloorisyklobuteeni



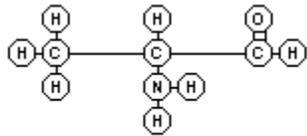
1,3-propanidioli



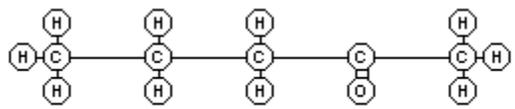
2-amino-1,3-propanedioli



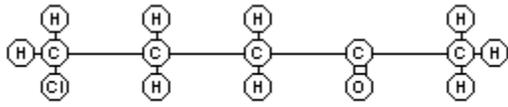
propaanidiaali



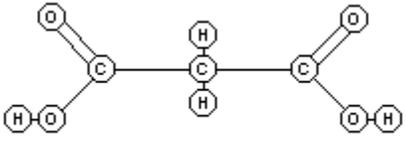
2-aminopropanaali



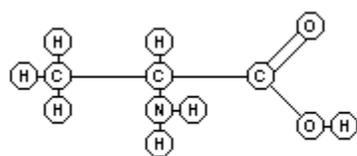
2-pentanoni



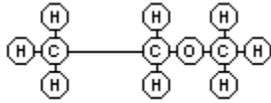
5-kloori-2-pentanoni



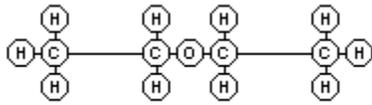
propaanidihappo



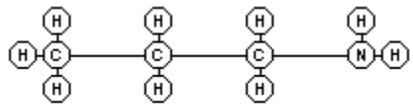
2-aminopropaanihappo



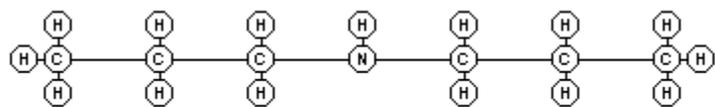
etyylimetyylieetteri



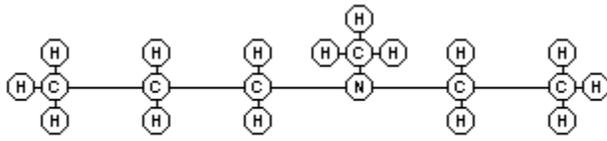
dietylietteri



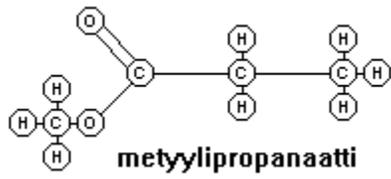
propyyliamiini

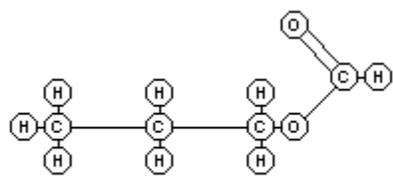


dipropyyliamiini

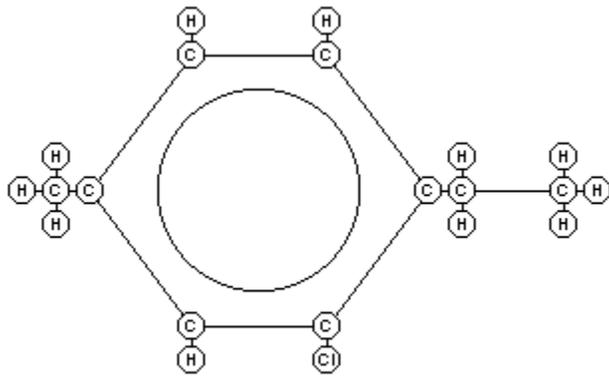


etyylimetyylipropyliamiini

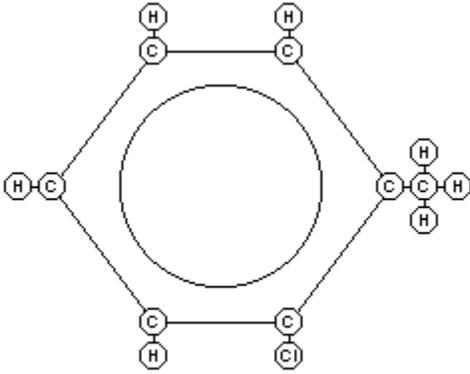




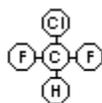
propyylimetanaatti



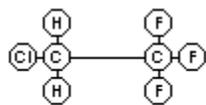
1-etyyli-2-kloori-4-metyylibentseeni



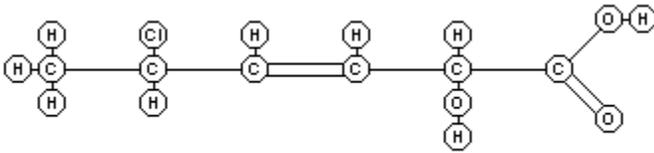
1-kloori-2-metyylibentseeni



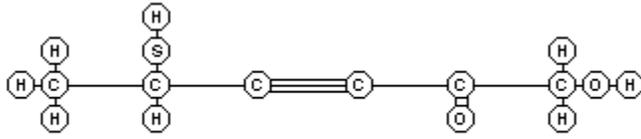
cfc-22



cfc-133



2-hydroksi-5-kloori-3-cis-hekseenihappo



1-hydroksi-5-merkapt-3-heksyyini-2-oni

