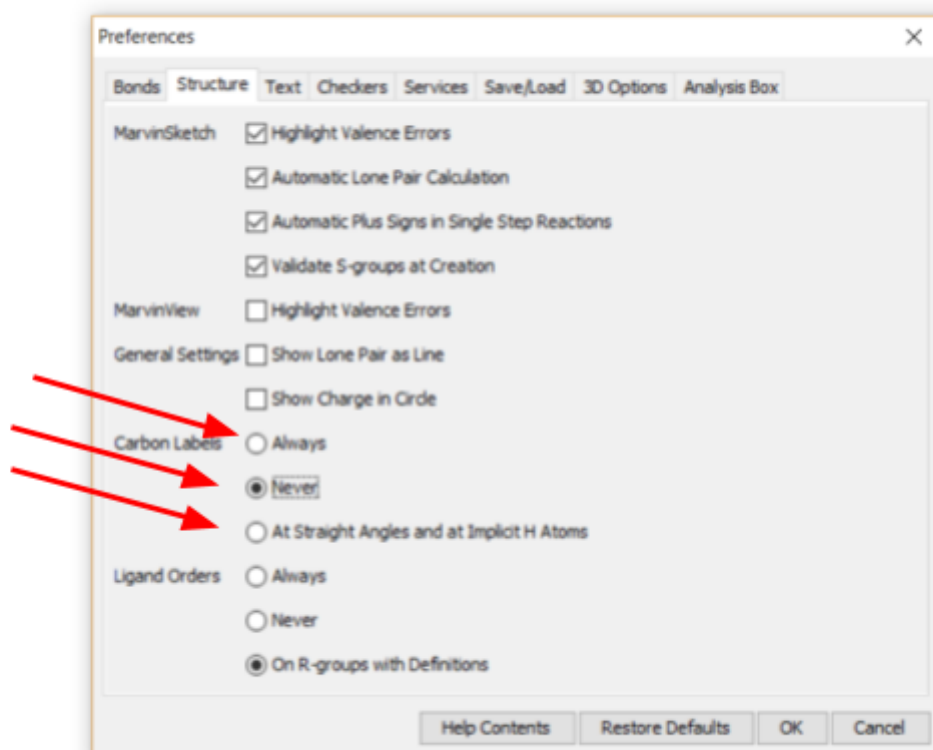
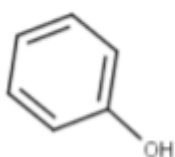


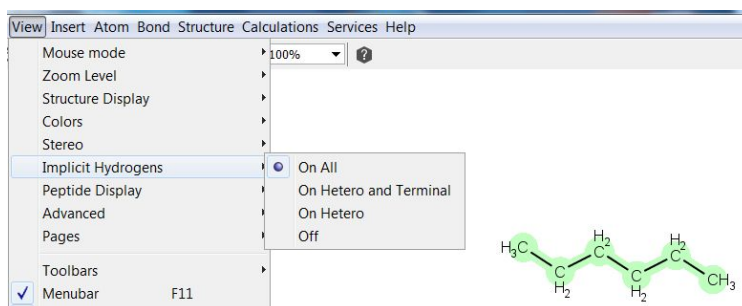
# MarvinSketch-pikakäyttöohjeet

**Hiiliatomit:** Edit / Preferences / Structure ja Carbon Labels

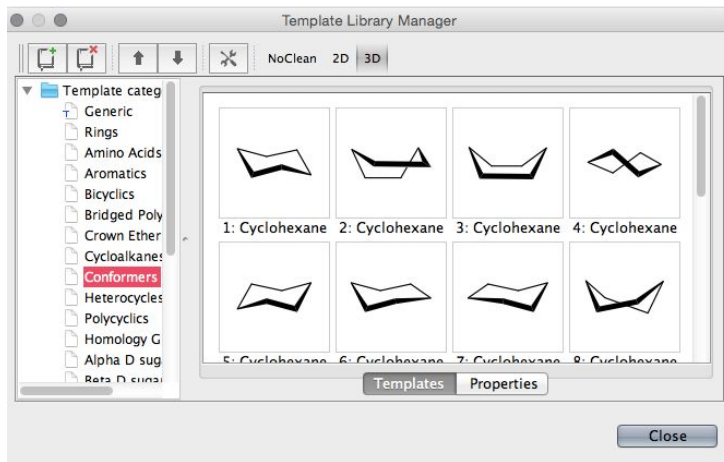


**Vedyt:** Structure / Add / Explicit Hydrogen (pitää lisätä joka kerta -> täydellinen rakennekaava)

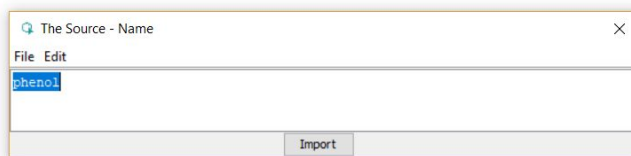
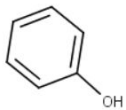
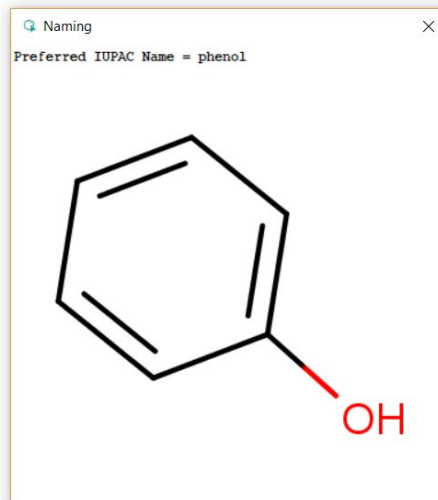
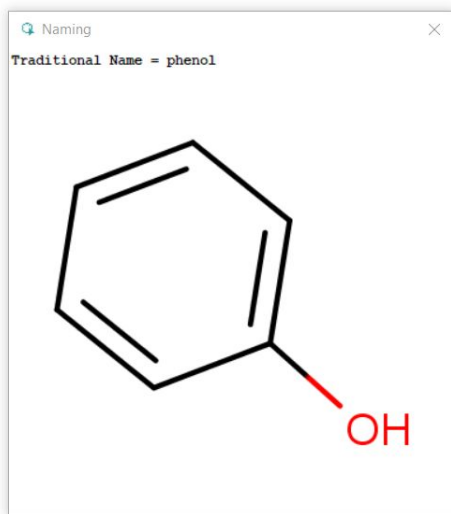
Edit / Implicit Hydrogen ja On All (tulevat automaattisesti)



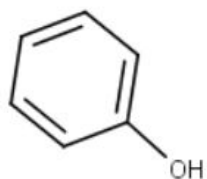
Valmiita yhdisteitä ja runkoja : Edit / Template Library...



Nimeäminen: Structure / Generate Name tai Structure / Name Structure

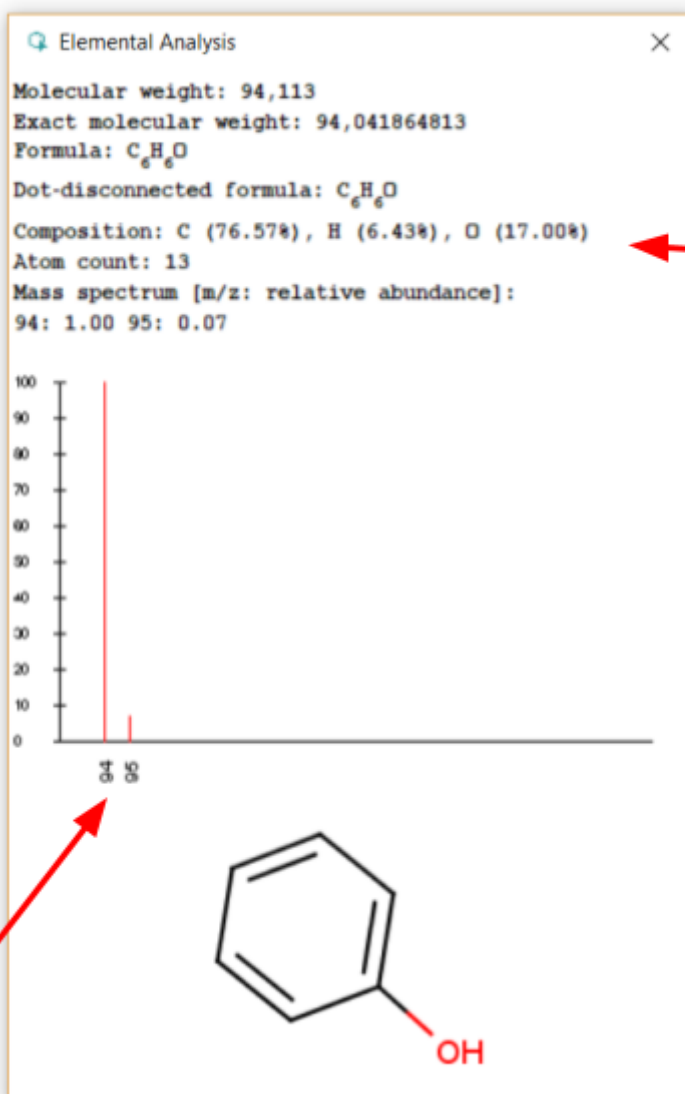


**Nimeäminen, molekyylipaino ja molekyylikaava:**  
Structure / Place Analysis box




Name: phenol  
Molecular weight: 94,11  
Formula: C<sub>6</sub>H<sub>6</sub>O

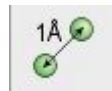
**Molekyylipaino, molekyylikaava, massaprosenttinen koostumus, massaspektri:**  
Calculations / Elemental Analysis



## Molekyyli 3D:

Calculations / Geometry / Molecular Surface Area(3D) tai

View / Editor Style / View Mode (valitse MarvinSpace  )



Vedyt näkyviin

siduskulmat

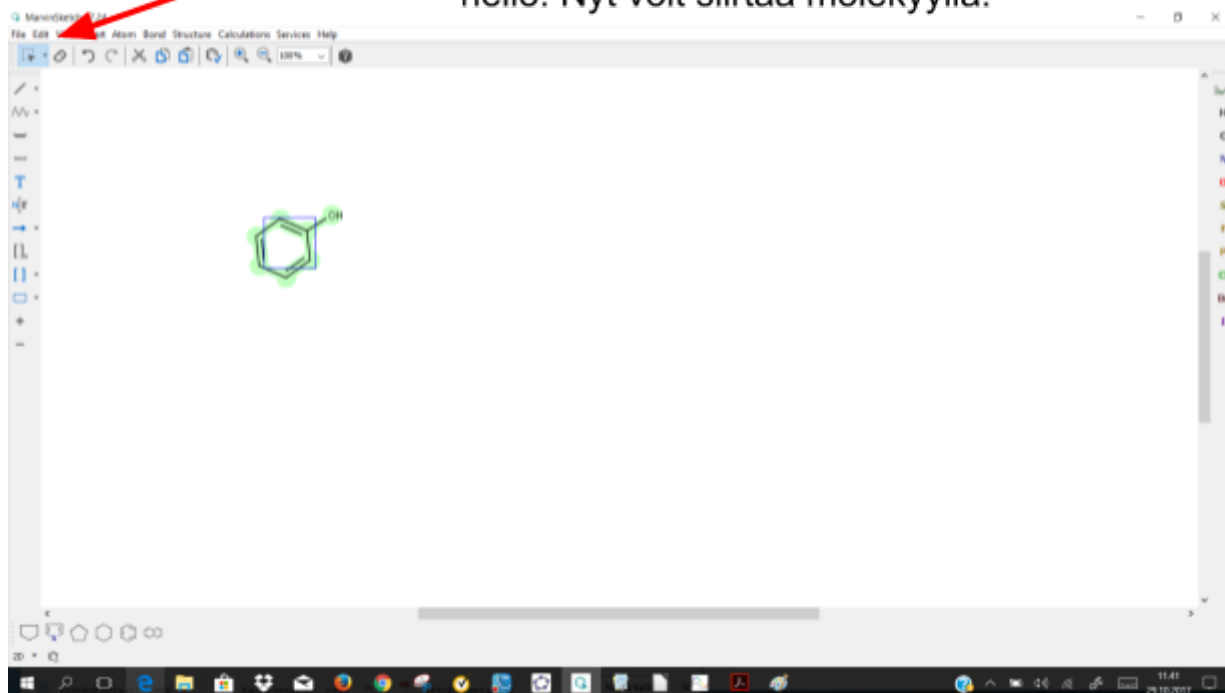
sidoksen pituus

Takaisin View / Editor Style / View Mode (valitse Marvin)

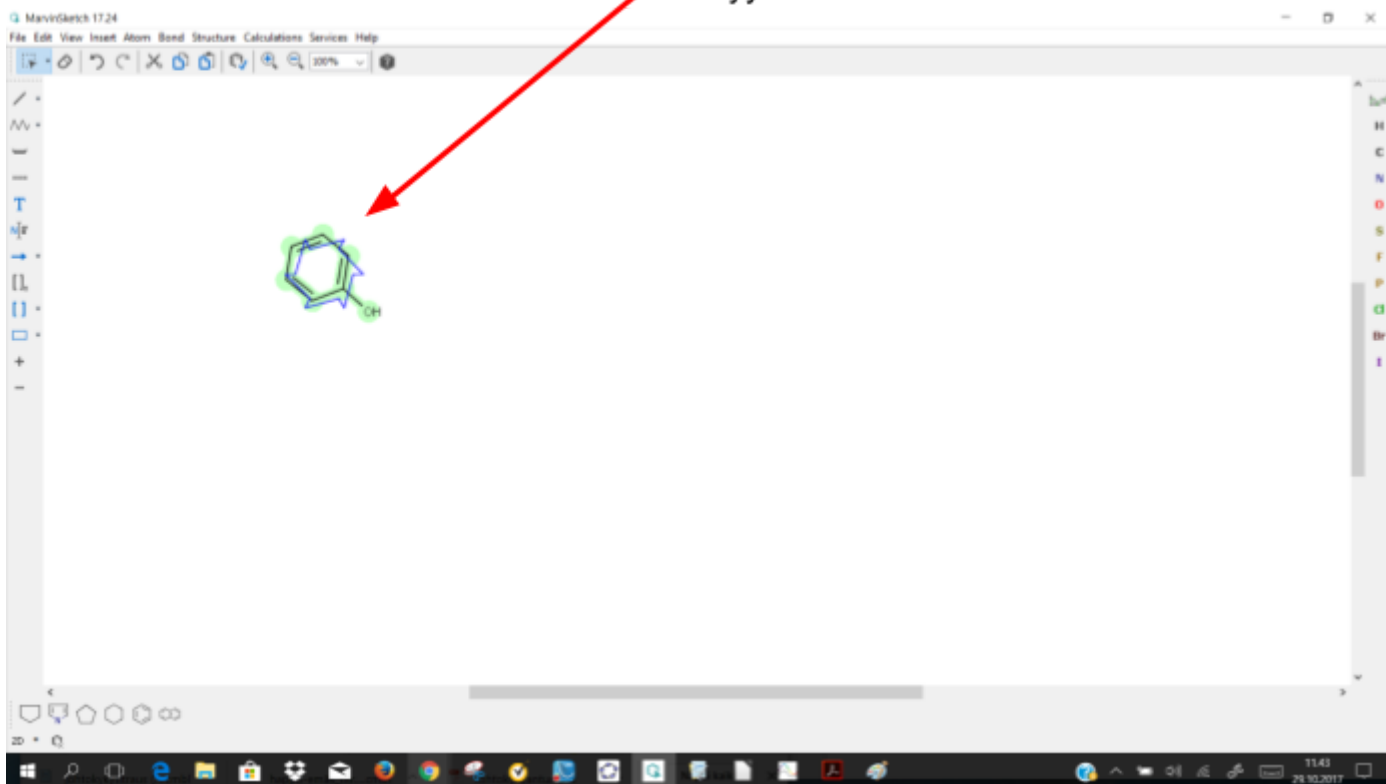
**PIKANÄPPÄIN** MarvinSpaceen **ctrl+shift+M**

## Molekyylin siirtäminen ja pyörittäminen:

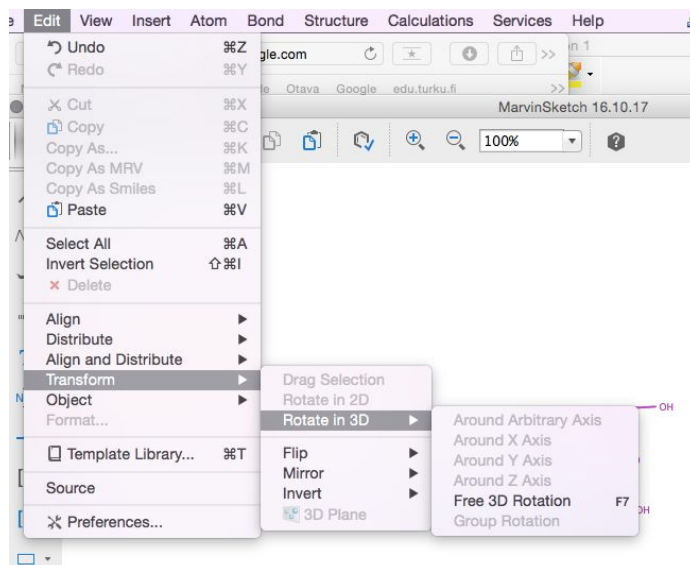
Valitse molekyyli ja kun menet hiirellä molekyylin päällä, ilmestyy neliö. Nyt voit siirtää molekyyliä.



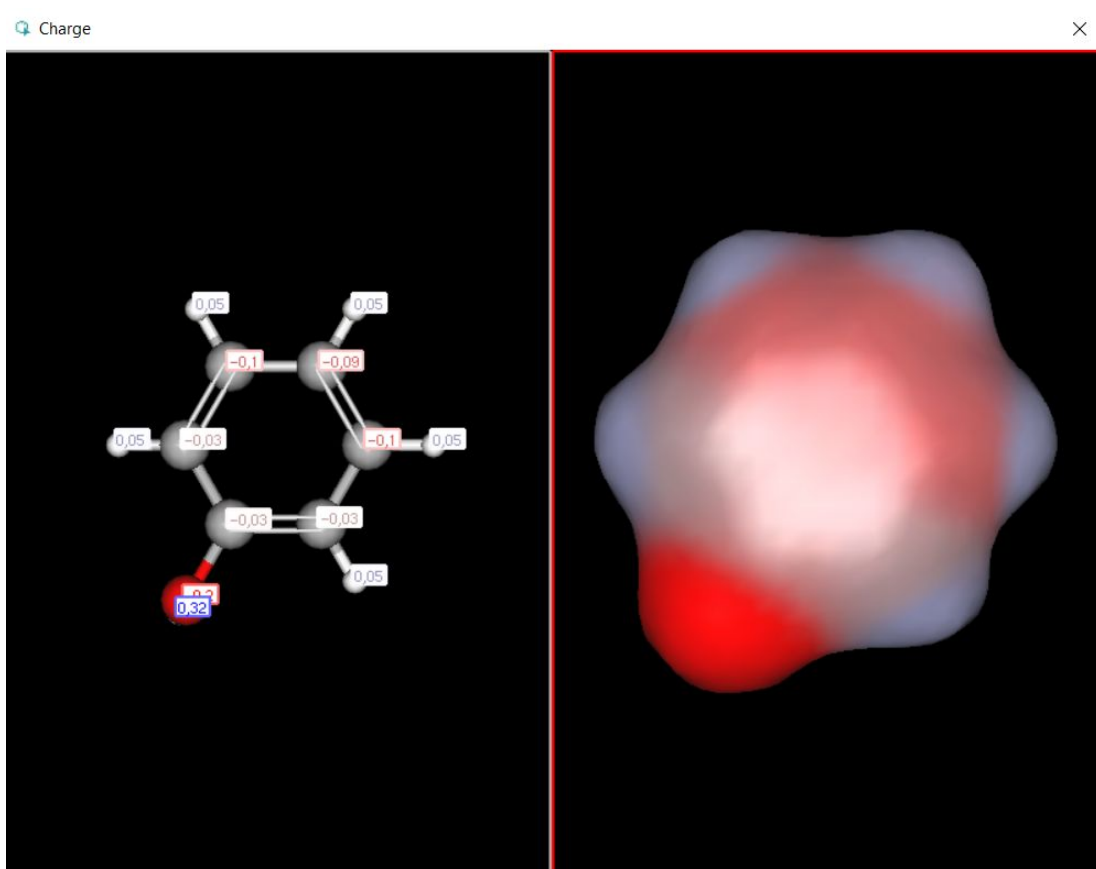
Kun kuvaan ilmestyy sahalaita, niin voit pyörittää molekyyliä 2-ulotteisesti



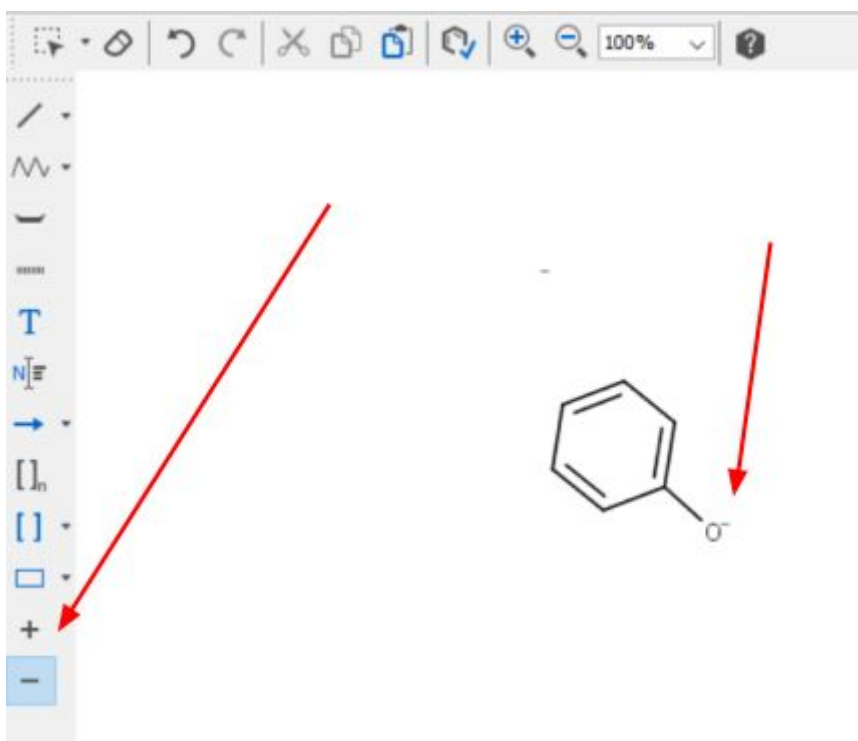
Kolmiulotteinen pyörittäminen: Edit / Transform/ Rotation in 3D /Free 3D Rotation



**Poolisuus:** Calculations/ Charge / Charge



**Ionit:** Valitse alkuaine, sivuvalikosta + tai - ja klikkaa sen jälkeen alkuainetta



# Vapaat elektroniparit: View / Advances / Lone Pairs



## Vetysidos:

File Edit View Insert Atom Bond Stru

- 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**
- Coordinate

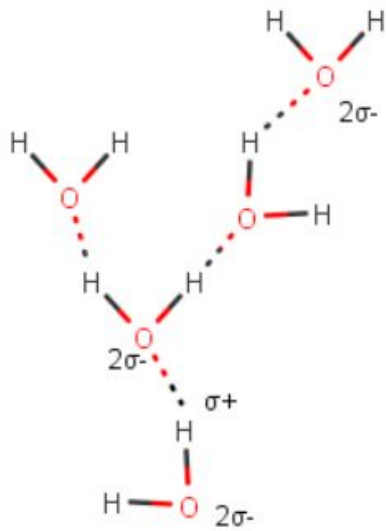
T saat lisättyä tekstiä

Erikoissymbolit

σ β α ° Δ Σ

Y [sanfont U-03C]

Ω Symbols...



## Polymeerit:

Software interface showing the menu bar (File, Edit, View, Insert, Atom, Bond, Structure, Calculations, Services, Help) and a toolbar. A red arrow points to the 'Insert' menu, which is open, showing options like  $N[\sigma]$ ,  $\rightarrow$ ,  $[ ]_n$ ,  $[ ]$ , and  $+$ . To the right, a chemical structure of ethane is shown with brackets and a subscript  $n$ , indicating it is a polymer repeat unit.

Dialog box titled "Create Group" with the following settings:

- Type: SRU polymer(n)
- SRU polymer label: n
- Polymer repeat pattern: head-to-tail(ht)
- Bracket style: square[]

Buttons: OK, Cancel



**Orgaaniset reaktiot:**

Jos funktionaaliset ryhmät vietään päällekkäin, on sillä merkitys mikä ryhmä on päällimmäisenä

