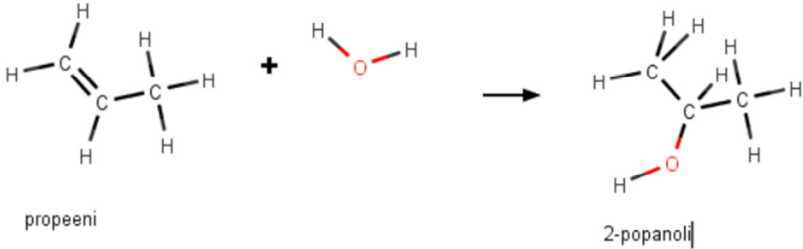
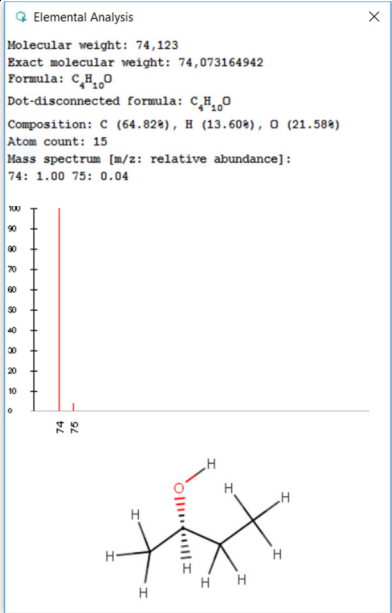


Joitakin hyödyllisiä toimintoja MarvinSketchissä:

työkalut	view -> toolbars (general, basic, atoms jne.)
molekyylin piirtäminen	valitse hiiliketju, atomien vaihto, sidosten lisäys ym.
Hiiliatomit näkyviin/pois näkyvistä	Edit -> preferences -> structure -välilehti -> valitse <i>always/never</i> kohtaan <i>carbon labels</i> (kannattaa laittaa näkyviin aina)
Vetyatomit näkyviin/pois	Structure -> add/remove explicit hydrogens (kannattaa laittaa näkyviin)
Erilaisia rakenteen esitystapoja	View -> display -> valitse haluamasi (Wireframe with Knobs selkeä)
cis- ja trans-isomeerit	ketjun muodon vaihtaminen
2D->3D	Klikkaa "kukan" näköistä kuvaketta (Marvin Space), odota, toiminto kestää vähän aikaa). Huom! Vetyatomit saa näkyviin, kun klikkaa työkaluvalikosta kuvaketta, jossa on vihreä ja harmaa pallukka ja sieltä <i>All</i> tai ctrl+shift+M (paina kaikkia yhtä aikaa)
Molekyylin varausjakauma 3D:nä	Marvin Spacessa: Show surfaces->van der Waals->Color Type->Surface->Electrostatic potential
Sidoskulmien ja sidospituuksien mittaaminen	Voit mitata esim. C-C sidospituuden valitsemalla sidos-näppäimen ja klikkaamalla kahta peräkkäistä atomia tai kolmen atomin välisen kulman valitsemalla kulmanäppäimen ja klikkaamalla atomeja 1, 2(kärki), 3
Molekyylin siirtäminen ja pyörittäminen	"klikkaa" vasemmassa yläkulmassa olevaa ruutunäppäintä, aktivoi molekyyli ympyröimällä se -> neliö (pidä hiiren vasen näppäin pohjassa, SIIRRÄ molekyyli -> ratas PYÖRITTÄÄ molekyyliä)
Nimeäminen	Calculations -> naming (traditional/ IUPAC)
Vetysidoksen piirtäminen	Insert bond -> type -> any (tai pikavalikosta vasemmalta)
Varauksen lisääminen atomille	Työkaluvalikosta valitse + tai - ja klikkaa haluamaasi atomia
Dipolin osittaisvarauksen merkitseminen	Lisätään tekstikenttänä
uusi ruutunäkymä	file -> new -> clear desk
Reaktioyhtälön kirjoittaminen	Piirrä molekyylit, lisää vedyt, puhdistu rakenteet, lisää nuoli lähtöaineiden ja reaktiotuotteiden välille (insert arrow tai suoraan sivupalkista) Huomaa, että + - merkki tulee samalla.

	<p>Yhdisteiden nimet voi lisätä teksti (T)-komennolla. Ota kuvankaappaus, kopio ja liitä.</p>  <p>propeeni</p> <p>2-popropanoli</p>
<p>Molekyylin analyysi: (moolimassa, molekyylikaava, massaprosenttinen koostumus, massaspektri: Iso piikki kertoo yhdisteen moolimassan)</p>	<p>Calculations -> elemental analysis</p>  <p>2-propanoli</p>
<p>Atomien numerointi</p>	<p>View -> advanced -> atom numbering (eivät näy ohjelman opiskelija-versiossa)</p>
<p>Vapaat elektroniparit, sidospituudet ja muuta jännää</p>	<p>View -> advanced -> valitse haluamasi. Vapaat elektroniparit = lone pair (eivät näy ohjelman opiskelija-versiossa)</p>