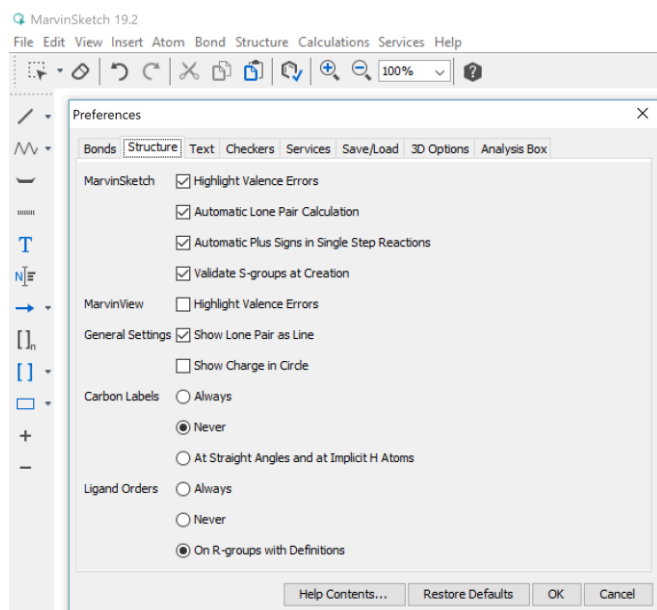


MarvinSketch 2 – Perusasetuksien muuttaminen

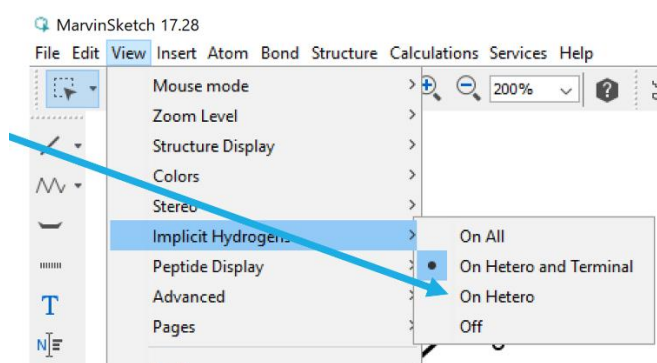
7.3.2019

Oletusasetuksilla saadaan 2-butanolista seuraavan kaltainen kuva (kuva 1). Tämä kuva vaatii hieman säätämistä.

Vaihe 1: Valitaan kohdassa Edit | Preferences | Structure | Carbon Labels kohta Always. Saadaan kuvan 2 mukainen tilanne.

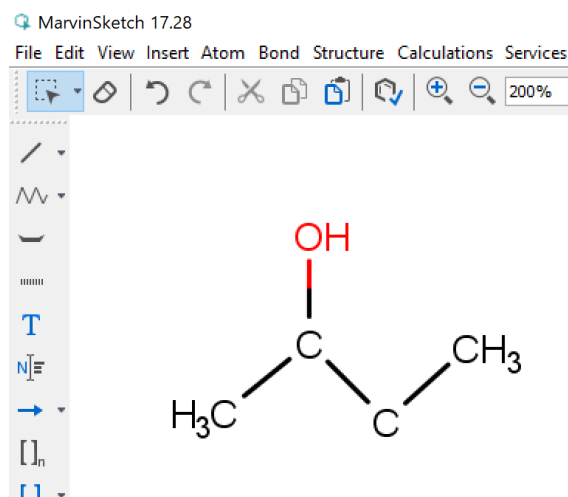


Vaihe 2: Valitaan View | Implicit Hydrogens valitaan täydellisen rakennekaavan tapauksessa On All, saadaan kuvan 3 mukainen tilanne.

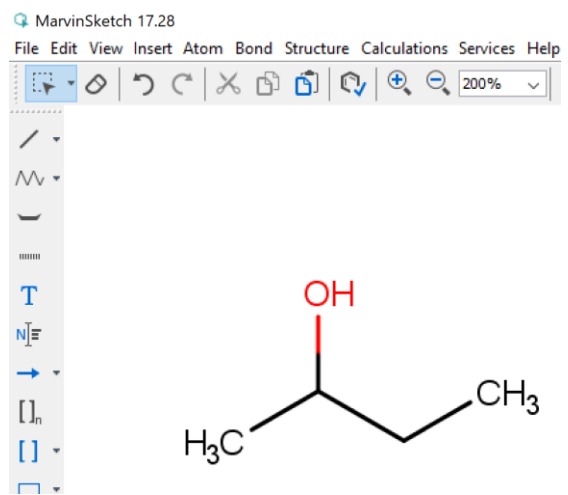


Kuvan 3 on lähes kelvollinen supistettu rakennekaava, ainoan pulman muodostaa molekyylissä näkyvä H₂-kohta, joka mahdollistaa virhekäsityksen, jonka mukaan hiileen olisi liittyneenä vety-molekyylillä H₂.

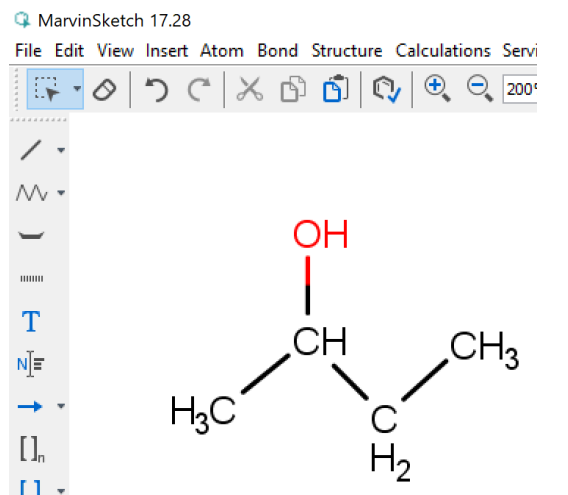
Kuva 1.



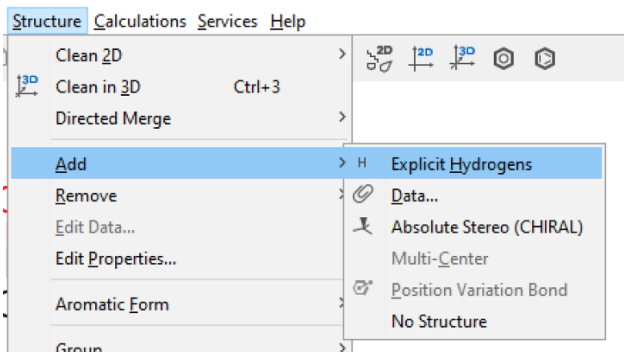
Kuva 2.



Kuva 3.

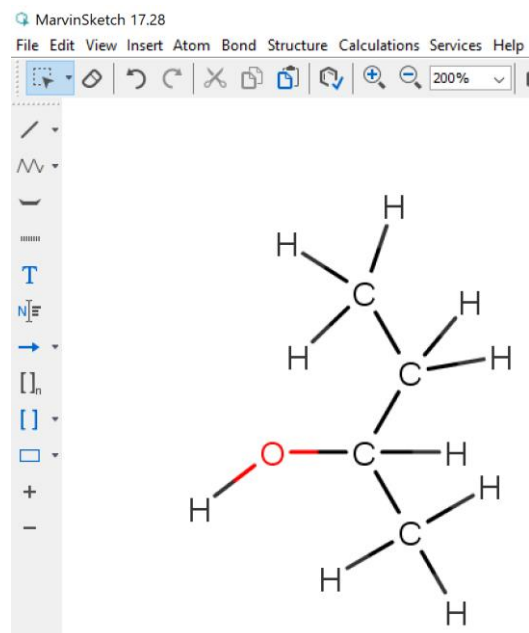


Täydellisen rakennekaavan piirtäminen vaatii vielä yhden muokkauksen, Structure | Add | Explicit Hydrogens:



Viereinen kuva on käynyt läpi vielä rakenteen optimoinnin (Structure | Clean 2D).

Kuva 4.



Orgaanisessa kemiassa varsinaisesti on käytössä **viivakaavat**. Kuvassa 5 on 2-butanoli viivakaavana. Tätä merkintätapaa suosittelen.

Kuvassa oleva kysymysmerkki (mikä ei tule automaattisesti) johdattelee seuraavaan teemaa eli **isomeriaan**.

Kuva 5.

