

# MarvinSketch 5 – MarvinSketch ja yhdisteiden nimeäminen

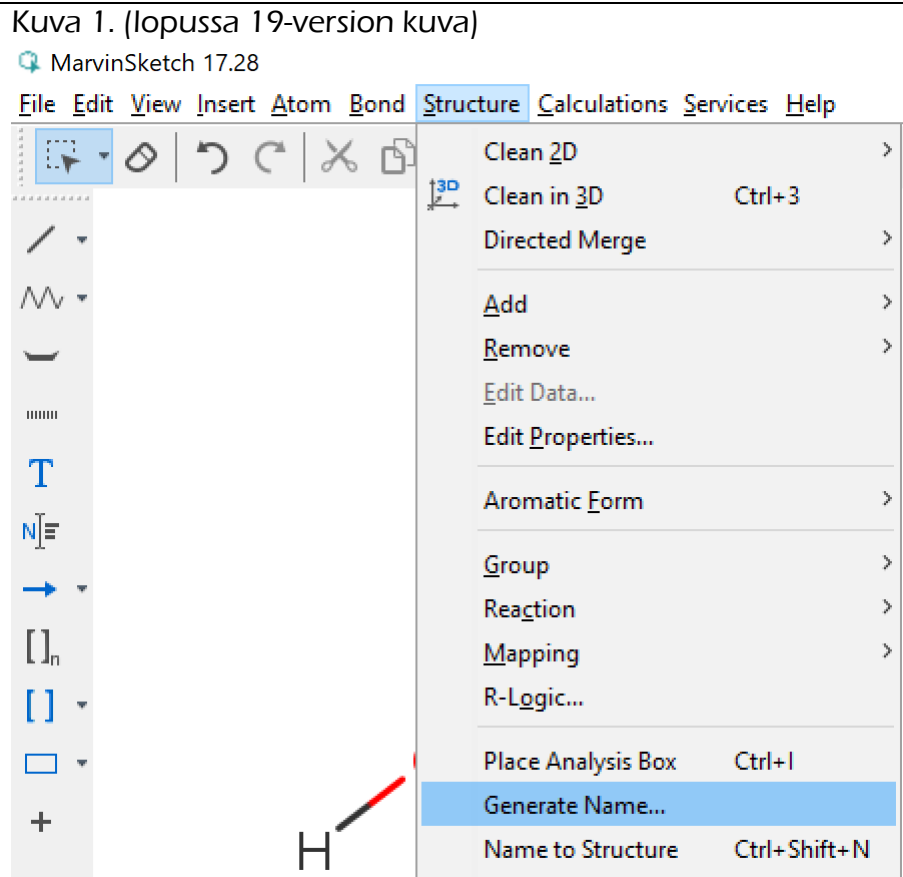
16.3.2019

MarvinSketch-ohjelmalla voidaan **piirretyistä molekyyleistä tuottaa IUPAC- ja/ tai triviaalinimet**. Toiminto antaa nimen englannin kielellä ja kaikilla isomeriatiedoilla (E/Z ja R/S).

Valitaan Structure | Generate Name ja sitten valitaan IUPAC-nimi (Preferred IUPAC Name) ja/ tai triviaalinimi (Traditional Name).

Alla esim. erään penteenin nimeämisestä.

Kuva 1. (lopussa 19-version kuva)

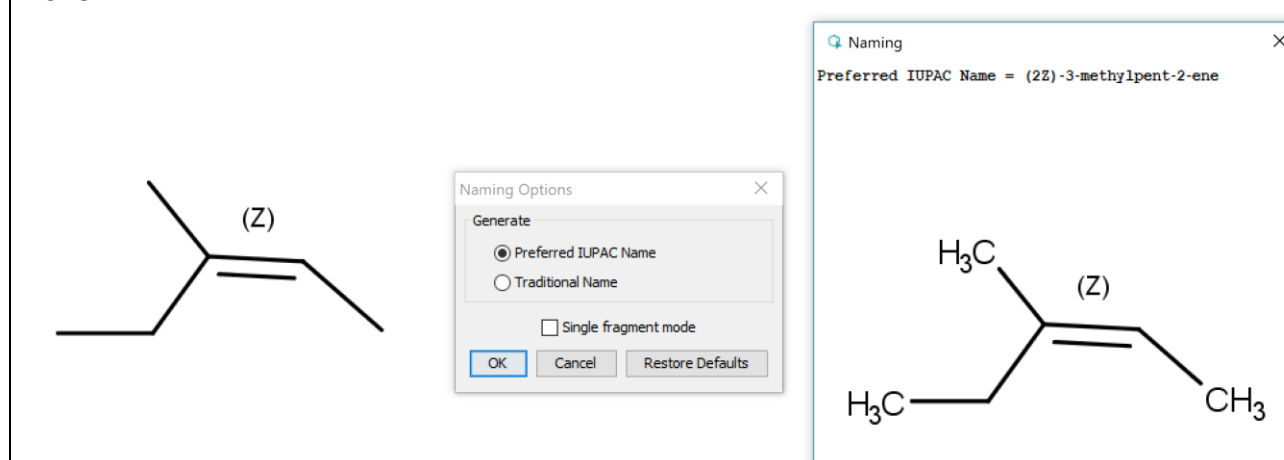


MarvinSketch 17.28

File Edit View Insert Atom Bond Structure Calculations Services Help

- Clean 2D
- Clean in 3D Ctrl+3
- Directed Merge
- Add
- Remove
- Edit Data...
- Edit Properties...
- Aromatic Form
- Group
- Reaction
- Mapping
- R-Logic...
- Place Analysis Box Ctrl+I
- Generate Name...**
- Name to Structure Ctrl+Shift+N

Kuva 2



Naming Options

Generate

- Preferred IUPAC Name
- Traditional Name

Single fragment mode

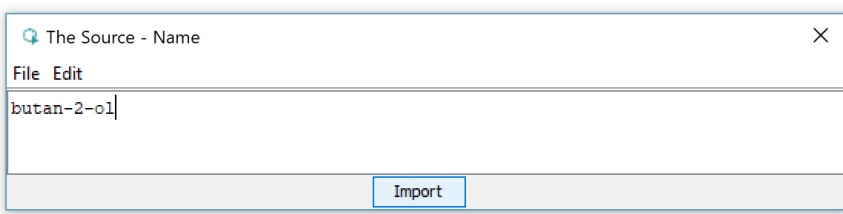
OK Cancel Restore Defaults

Naming

Preferred IUPAC Name = (2Z)-3-methylpent-2-ene

## Rakenteen generoiminen nimestä

MarvinSketch tuottaa molekyyliarakenteen nimestä. MarvinSketchillä on myös oma kirjastonsa, jossa on valmiita rakenteita.

<p>Nimi annetaan englanniksi. Ohjelma antaa 2D-mallin.</p>	<p>Kuva 3</p> 
<p>Edit   Template Library - valinnalta avautuu oma ikkuna, josta voi poimia valmiita rakenteita.</p> <p>Kuva 4</p> <p>MarvinSketch 19.2</p> <p>File Edit View Insert Atom Bond Structure</p> <ul style="list-style-type: none"><li>Undo (Ctrl+Z)</li><li>Redo (Ctrl+Y)</li><li>Cut (Ctrl+X)</li><li>Copy (Ctrl+C)</li><li>Copy As MRV (Ctrl+M)</li><li>Copy As OLE (Ctrl+D)</li><li>Copy As Smiles (Ctrl+L)</li><li>Paste (Ctrl+V)</li><li>Select All (Ctrl+A)</li><li>Invert Selection (Ctrl+Shift+I)</li><li>Delete</li><li>Align</li><li>Distribute</li><li>Align and Distribute</li><li>Transform</li><li>Object</li><li>Format...</li><li><b>Template Library... (Ctrl+T)</b></li><li>Source...</li><li>Preferences...</li></ul>	<p>Kuva 5</p> <p>MarvinSketch 19.2</p> <p>File Edit View Insert Atom Bond Structure Calculations Services Help</p> <p>200%</p> <p>Template Library Manager</p> <p>NoClean 2D 3D</p> <ul style="list-style-type: none"><li>Generic<ul style="list-style-type: none"><li>Rings<ul style="list-style-type: none"><li>Cyclopentyl rings</li><li>Phenyl rings</li></ul></li><li>Amino Acids</li><li>Aromatics</li><li>Bicyclics</li><li>Bridged Polycyclics</li><li>Crown Ethers</li><li>Cycloalkanes</li><li>Conformers</li><li>Heterocycles</li><li>Polycyclics</li><li>Homology Groups</li><li>Alpha D sugars</li><li>Beta D sugars</li><li>Deoxynucleosides</li><li>Flavonoids</li><li>Nucleobases</li><li>Nucleosides</li><li>Organometallics</li><li>Peptide building blocks</li><li>Protoalkaloids</li><li>True Alkaloids</li><li><b>Vitamins</b></li><li>My Templates</li></ul></li></ul> <p>1: Vitamin A, 2: Vitamin B1, 3: Vitamin B5, 4: Vitamin B6, 5: Vitamin B7, 6: Vitamin B9, 7: Vitamin C, 8: Vitamin D3, 9: Vitamin D4</p> <p>Templates Properties</p> <p>Close</p>

## \*) MarvinSketch 19-version kuvat

2-Buteeni.mrv - MarvinSketch 19.2

