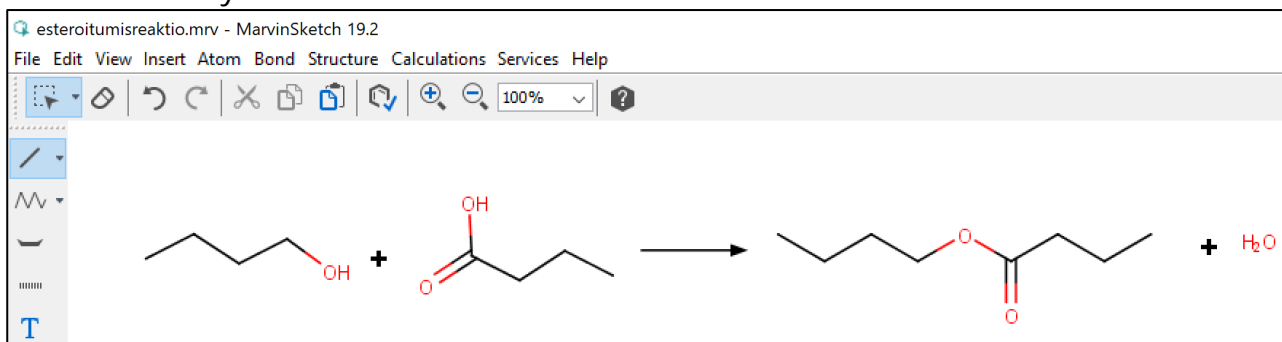


MarvinSketch 8 – Reaktioiden piirtäminen ja nuolet

21.4.2019

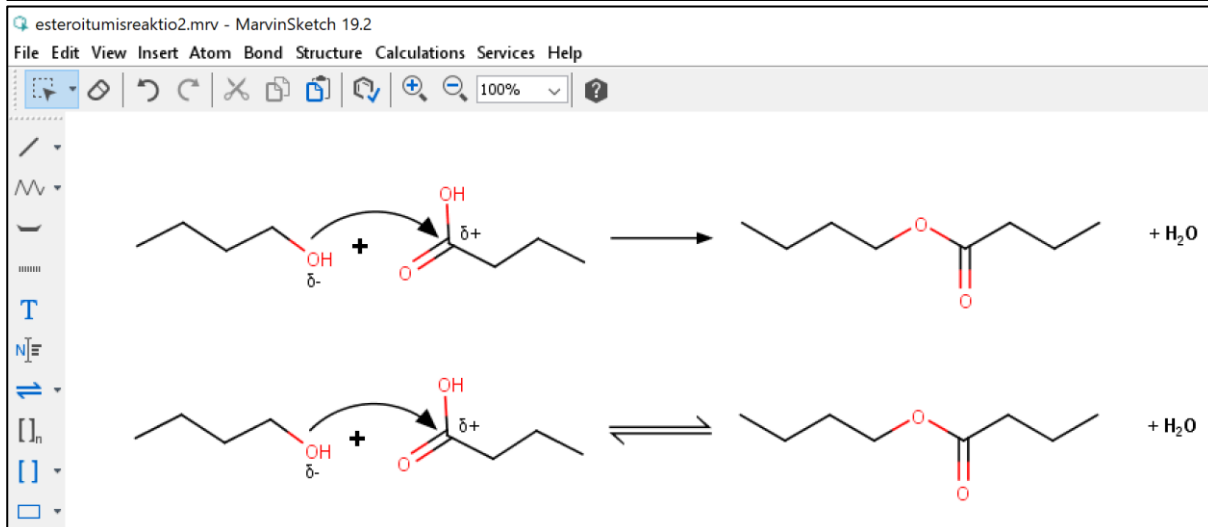
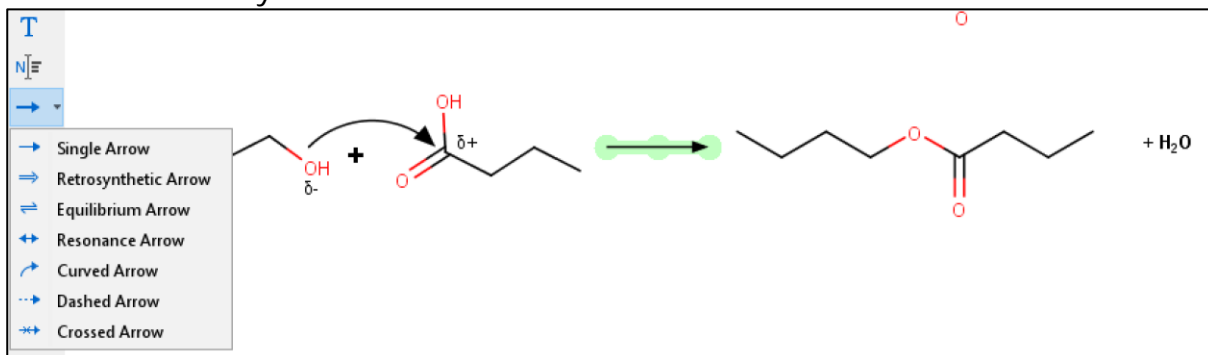
MarvinSketch-ohjelma mahdollistaa reaktioyhtälöiden piirtämisen mahdollistaen erilaiset nuolet (myös reaktiomekanismien kuvaamiseen tarkoitettuja) ja automaattiset plus-merkit. Plus-merkkiautomaatiikan käytöllä on rajoituksensa. Se toimii käytännössä vain yhden reaktion kuvaamisessa.

Kuva 1: Esteröitymisreaktio



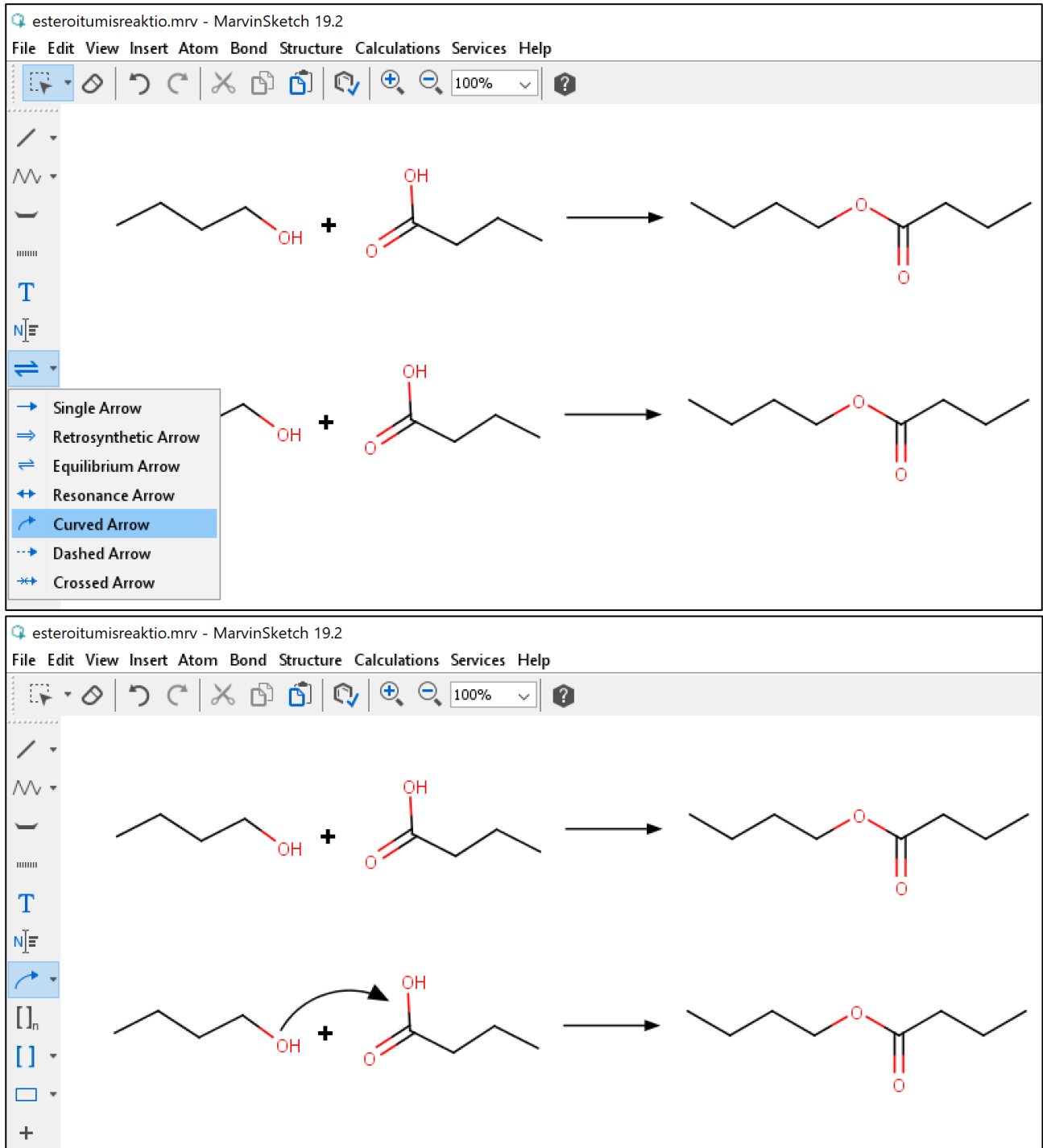
Jos ja kun ollaan tarkkoja siinä, että kyse on tasapainoreaktiosta, käytetään toisenlaista reaktionuolta. Valitaan reaktionuoli ja vasemman reunan valikosta valitaan nuoli-ikoni ja vaihdetaan yksisuuntainen reaktionuoli kaksisuuntaiseksi.

Kuvat 2-3: Esteröitymisreaktion nuolen vaihtaminen



Yllä olevassa kuvassa näkyy myös toisenlainen nuoli. Siinä reaktiomekanismin piirtämiseen käytetään kaarinnuolta.

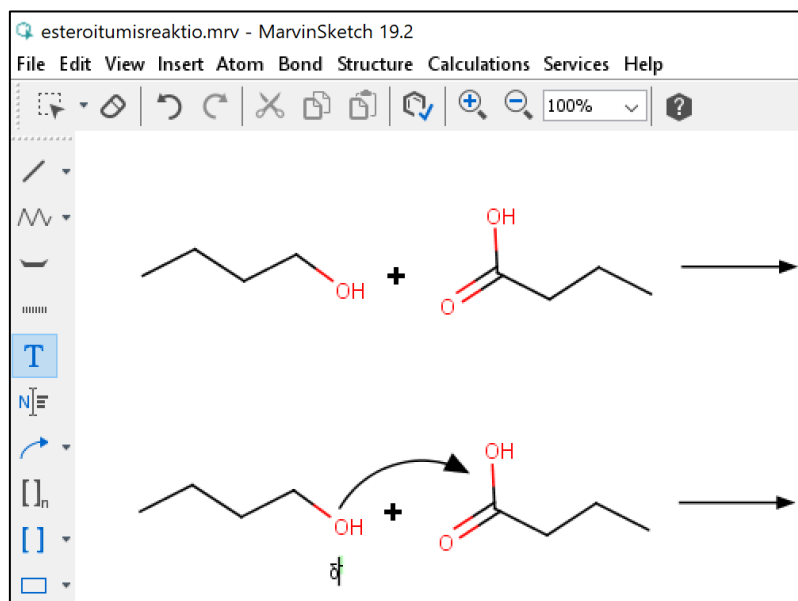
Kuva 4-5: Reaktiomekanismin kuvaamista kaarinnuolella



Reaktiomekanismin kuvaamisessa käytetään usein myös selittäviä merkintöjä, kuten esimerkiksi osittaisvarauksia. Alla olevassa kuvassa osittaisvarauksen piirtämiseen on käytetty tekstityökalua ja valittu symboleista sopiva kreikkalainen kirjain.

Kuva 6. Osittaisvarauksen piirtäminen

Tekstityökalun valinta avaa työpöydän alareunaan editorin, josta voi valita fontin lisäksi alaindeksiin tai yläindeksiin sekä symbolin.



Kuva 7: Tekstityökalun käyttö esim. osittaisvarauksen piirtämiseen.

Symboli ilmestyy tekstikenttään, kun seuraava kirjain tai merkki (osittaisvarauksen vapauksessa + tai -) lisätään tekstiin. Muuttaminen ylä- tai alaindeksiksi tapahtuu valitsemalla ko. merkki ja klikkaamalla alareunan valikon oikeaa kohtaa.

