

Marvin – joitakin hyödyllisiä toimintoja (saa muokata vapaasti!)

Nimeäminen	Structure -> generate name
"tietolaatikko" molekyylistä rakenteen oheen	Structure -> place analysis box
Molekyylin analyysi (M, molekyylikaava, massaprosenttinen koostumus, massaspektri)	Calculations -> elemental analysis
Hiiliatomit näkyviin/pois näkyvistä	Edit -> preferences -> structure-välilehti -> valitse <i>always/never</i> kohtaan <i>carbon labels</i>
Vetyatomit näkyviin/pois	Structure -> add/remove explicit hydrogens
Erilaisia rakenteen esitystapoja	View -> structure display -> valitse haluamasi
Rakenne 3D:nä	Calculations -> geometry -> molecular surface area -> tarkista, että kohdassa <i>show surface area increments</i> ei ole ruksia ja klikkaa ok ja taas ok. Myös View -> Editor style -> view mode -> klikkaa kukan näköistä kuvaketta työkaluvalikossa ja ikkuna vaihtuu
Atomien numerointi	View -> advanced -> atom numbering
Vapaat elektroniparit, sidospituudet ja muut jännää	View -> advanced -> valitse haluamasi
Sidoskulma	View -> Editorstyle -> view mode -> klikkaa kukan näköistä kuvaketta työkaluvalikossa ja ikkuna vaihtuu -> työkaluvalikosta kulmakuvake, valitse sidokset klikkaamalla haluamiasi atomeja (kulman kärkiatomia toinen!) Huom! Jos haluat vetyatomeja näkyviin, klikkaa työkaluvalikosta kuvaketta, jossa on vihreä ja harmaa pallukka ja sielät <i>All</i>
Vetysidoksen piirtäminen	Piirrä sidos ja muokkaa bond -> type -> any (tai vastaavasti pikavalikosta)
Varauksen lisääminen atomille	Työkaluvalikosta valitse + tai – ja klikkaa haluaamaasi atomia
Dipolin osittaisvatauksen merkitseminen	
Molekyylin varausjakauma 3D:nä (jännä!)	Calculations -> charge -> charge -> klikkaa ok ja ok