



Marvin Beans

Die *Marvin Suite* ist ein sehr umfangreiches nichtkommerzielles Programmpaket für die akademische Forschung und Lehre. Sie enthält neben dem eigentlichen Zeichenprogramm *MarvinSketch* das Programm *MarvinView*, welches verschiedene 3D-Darstellungen der gezeichneten Strukturen ermöglicht. *MarvinSketch* ermöglicht verschiedene einfache Berechnungen zu den gezeichneten Strukturen. Eine Registrierung beim Hersteller *Chemaxon* ist für die Verwendung erforderlich.

Material

Auf der Unternehmenswebseite www.chemaxon.com im Menü *Products* weiter zu *Marvin* in den Downloadbereich navigieren. Bevor der Download startet, muss ein Benutzerprofil (ChemAxonPass) erstellt werden. Nach der Registrierung kann die jeweilige Version für das vorhandene Betriebssystem bzw. den Systemtyp ausgewählt und das Programmpaket heruntergeladen werden.

Anleitung

Das oben abgebildete Programmfenster ist die Arbeitsfläche von *MarvinSketch*, auf der gezeichnet wird. Um diese Arbeitsfläche sind verschiedene Werkzeugleisten angeordnet, die das Erstellen der Strukturen ermöglichen. Ganz oben befindet sich die Menüleiste.

Hilfreiche Voreinstellungen

Automatisches Anzeigen freier Elektronenpaare:

Zunächst öffnet man in der Menüleiste den Reiter *View* und wählt in der Auswahl *Advanced*. Hier kann nun durch einen Haken bei *Lone pairs* das automatische Anzeigen von freien Elektronenpaaren aktiviert werden. Allerdings verwendet *MarvinSketch* standardmäßig Elektronenformeln nach LEWIS (zwei Punkte statt einem Strich). Um die Elektronenpaare als Striche darstellen zu lassen, öffnet man in der Menüleiste *Edit* und wählt ganz unten die Schaltfläche *Preferences*. Anschließend wird der Reiter *Structure* angeklickt. Unter *General Settings* aktiviert man das Häkchen bei *Show Lone Pair as Line*.

Korrekte Darstellung von Formalen Ladungen:

Im gleichen Fenster (Menüleiste: *Edit* → *Preferences* → *Structure*) kann das Häkchen bei *Show Charge in Circle* aktiviert werden. Formale Ladungen werden nun mit Kreis dargestellt.

