

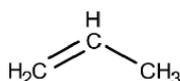


Fortsetzung: *Marvin Beans*

**Beispiel: Zeichnen der Strukturformel eines Prop-2-en-1-ol-Moleküls**

*C-Atomkette zeichnen*

In der Zeichenwerkzeuggeste wird das Bindungssymbol  angeklickt. Die Auswahl der gewünschten Bindungsart (Einfach-, Doppel-, Dreifachbindung, etc.) erfolgt mit Hilfe des kleinen Pfeils am rechten Rand des Bindungssymbols. Alternativ kann auch mehrmals auf eine Einfachbindung geklickt werden, bis die gewünschte Bindungsordnung erreicht ist. Durch Klicken und Ziehen auf die Arbeitsfläche wird zunächst die Grundstruktur eines Propen-Moleküls erzeugt.

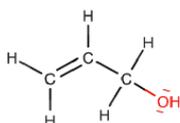


*Strukturformel automatisch mit H-Atomen ergänzen*

In der Menüleiste *Structure* wird die Option *Add* ausgewählt und hier *Explicit Hydrogens* angeklickt.

*OH-Gruppe anfügen*

Das *O*-Symbol auf der Atomartensymbolleiste rechts wird ausgewählt und ein H-Atom ersetzt.



*Strukturformel immer mit C-Atomen anzeigen lassen*

Der *Select*-Button  in der allgemeinen Werkzeuggeste wird aktiviert, die Lasso- oder Rechteckfunktion genutzt und die Formel markiert. Um die C-Atome immer darstellen zu lassen, öffnet man in der Menüleiste den Reiter *Edit* und wählt *Preferences*. Anschließend wird *Structure* angeklickt und unter *Carbon Labels* der Punkt bei *Always* gesetzt.

→ C-Atome werden immer angezeigt.

In der Menüleiste *Structure* wird die Option *Clean in 2D* oder der entsprechende Button angeklickt.

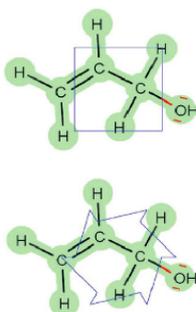
→ Die Formel wird geometrisch optimiert dargestellt.

*Nummerierung der C-Atome*

In der Menüleiste wird der Reiter *View* geöffnet und dann *Advanced* ausgewählt. Unter *Atom-Numbering* kann eine automatische Nummerierung, z.B. nach IUPAC aktiviert werden.

*Drehen und Verschieben von Strukturformeln*

Der *Select*-Button  wird aktiviert, um die Struktur zu markieren. Bei einer Bewegung des Mauszeigers zum Zentrum der markierten Struktur erscheint ein blaues Quadrat bzw. bei einer Bewegung an den Rand ein blaues Zahnrad (Ritzel). Nun kann mit Hilfe der linken Maustaste die Strukturformel verschoben bzw. gedreht werden.



*Einfügen von Ladungen/Radikalen:*

Möglichkeit 1: Auswahl des „+“ oder „-“ Symbols in der Zeichenwerkzeuggeste und Klick auf das betreffende Atom.

Möglichkeit 2: Rechtsklick auf das betreffende Atom. In der sich öffnenden Menüleiste können unter *Charge* eine „+/-“ -Ladung und unter *Radical* ein oder mehrere ungepaarte Elektronen eingefügt werden.

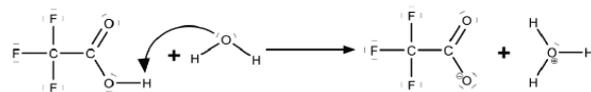
**Beispiel: Zeichnen der Reaktionsgleichung mit Elektronenbewegungspfeilen der Protonen-Übertragungsreaktion von Trifluoethansäure in Wasser**

*Zeichnen der Edukt- und Produktmoleküle*

Wie oben beschrieben, werden die Strukturformeln gezeichnet und angeordnet.

*Einfügen der Pfeile*

Durch Auswahl des Pfeilsymbols  in der Zeichenwerkzeuggeste kann ein Reaktionspfeil erzeugt werden. MarvinSketch ergänzt automatisch das Plusymbol zwischen den Eduktmolekülen und den Produktmolekülen. Mit Hilfe des kleinen Pfeils am rechten Rand des Pfeilsymbols können auch gebogene Pfeile, Gleichgewichtspfeile, Retrosynthesepfeile, etc. gezeichnet werden.



**Speichern und Exportieren gezeichneter Strukturen, Reaktionsgleichungen, etc.**

Standardmäßig werden die Dateien im Format ChemAxon-Marvin-Dokument (*.mrv*) abgespeichert (Menüleiste: *File* → *Save as*). Zum Einbinden der Abbildungen z.B. in Microsoft Word oder PowerPoint müssen die Abbildungen als Bilddatei exportiert werden. Dazu in der Menüleiste unter *File* → *Export to image* das gewünschte Dateiformat + Dateinamen auswählen. Anschließend kann noch die Größe der Bilddatei festgelegt werden, wobei mit Bildgröße auch der Speicherplatzbedarf steigt.

**Berechnungen mit MarvinSketch (Auswahl)**

*MarvinSketch* beinhaltet viele verschiedene Berechnungsmöglichkeiten für gezeichnete Strukturen, die schnell und einfach durchgeführt werden können. Die verschiedenen Berechnungen können in der Menü-Leiste unter *Calculations* aufgerufen werden.

*„Elemental Analysis“*

Hier können schnell wichtige Moleküleigenschaften, wie z.B. Molekülmasse, Molekülformel(n), berechnetes Massenspektrum, Prozentuale

