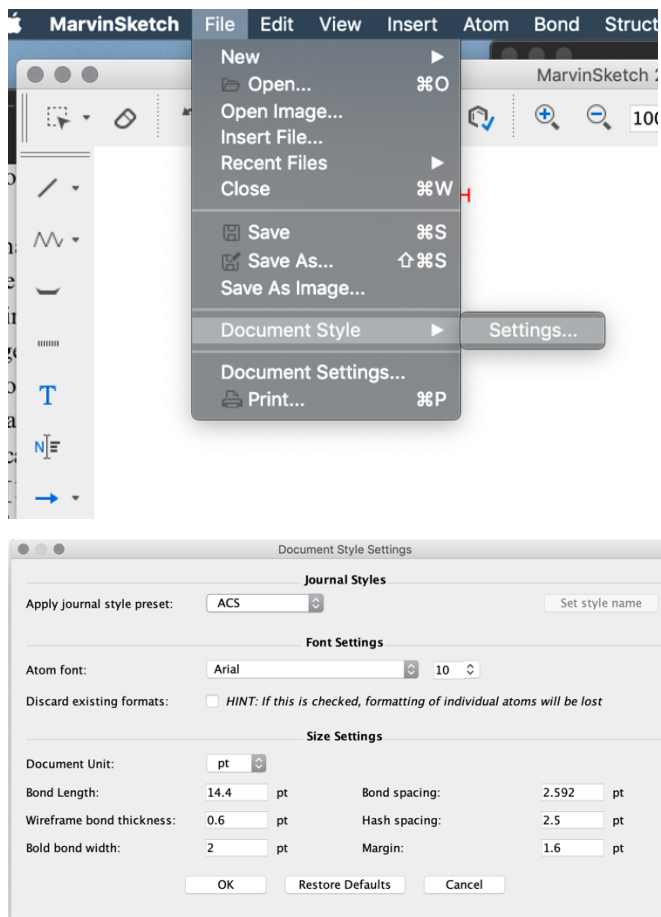


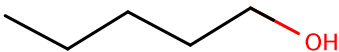
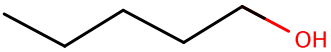
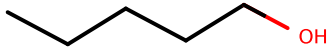


Marvin Sketch の使い方

書式の選択

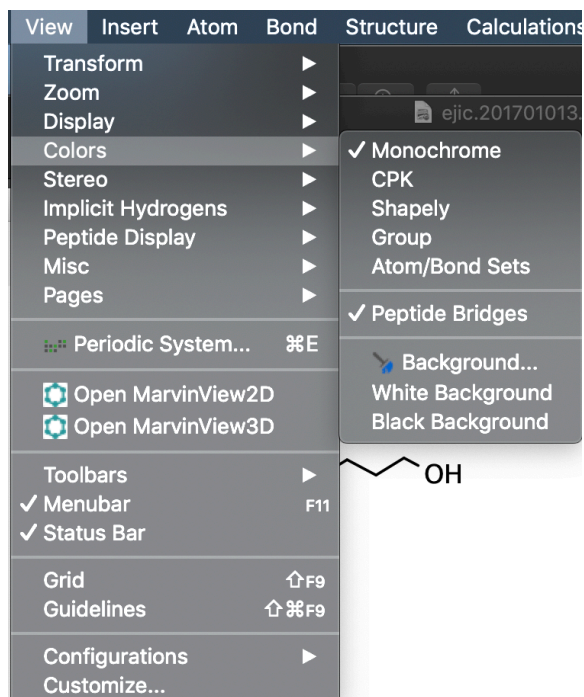
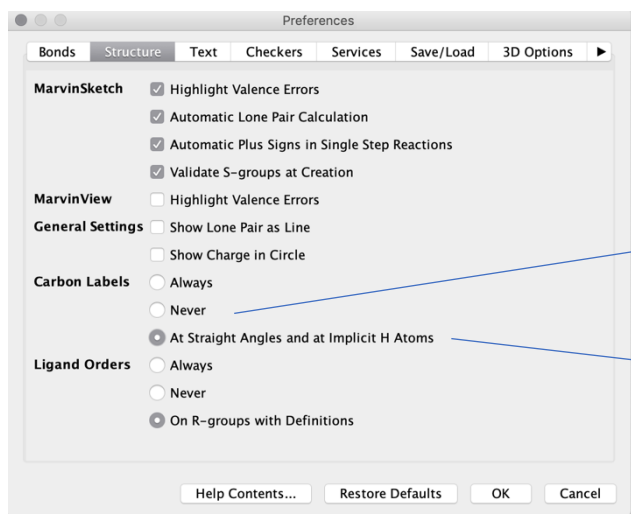


とりあえず journal style は ACS、RSC など無難なものを選択する。プレゼン用なら、Atom font を一回り大きくし、Wireframe bond thickness を上げたほうが見やすい

コピーしたときの見え方（環境によりけりかも）

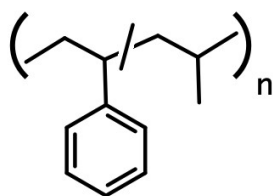
Copy As...	構造	フォーマットなど
PDF（表示よりも細くなるし、フォントが小さくなるが、きれい）		ChemAxon
		ACS
		ACS から Wireframe bond thickness = 1.2 フォントサイズは反映されない
JPG（表示に近いけど普通に使うと粗い。その他のオプションも）		同上
		Bond length など全部を 10 倍して JPG だと解像度を上げたままで、フォントサイズ・他の図形とのバランスなども反映可

表示方法



Monochrome か Group にすると元素
が黒で表示される
あとで個別に色変更もできる

Background で左上の☒を選ぶと、コ
ピペしたときの背景が透過になる

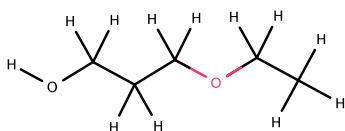
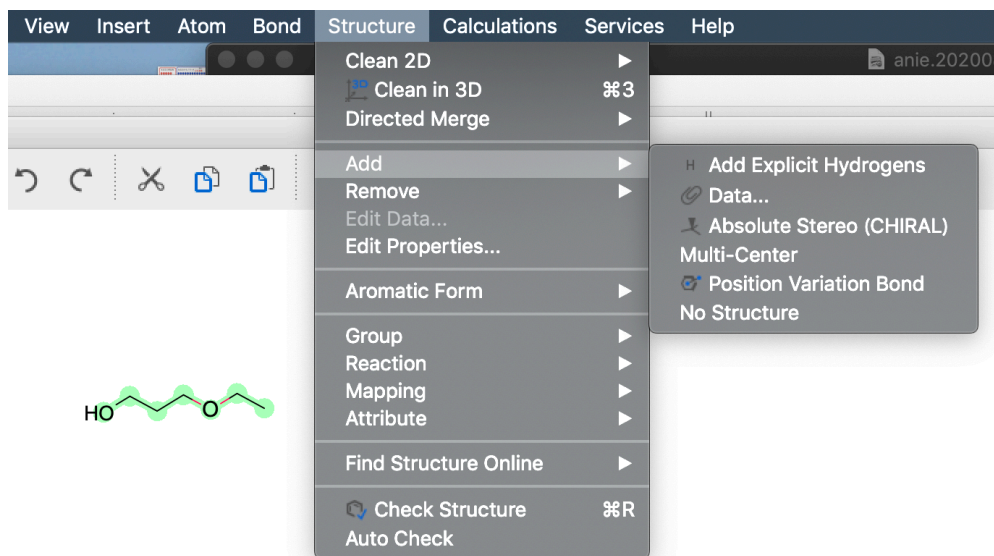


ポリマーだとこんな感じに書いて、コピペできる

(bond length とか 10 倍、カッコの太さ 20pt、n のフォントサ
イズ 96)

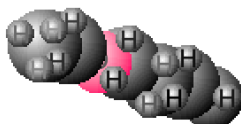
3Dにする方法

"Structure" -> "Add" -> "Add Explicit Hydrogens"



こうなる

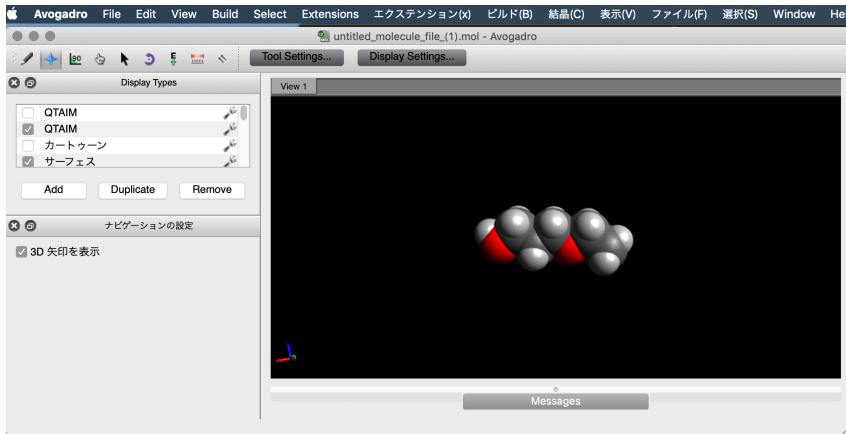
"Structure" -> "Clean in 3D"



こうなる

適当な名前で MDL Molfile (*.mol)形式で保存

Avogadroなどで開く (iRASPАなら XYZ か Gaussian 形式)



Avogadro の場合

その他

- ✓ このソフトに限らないが、一つのファイルにあまり多くの図を入れない方が
良い。一つのファイルにいろいろなものを入れると、どこに書いたかわかりに
くくなる。
- ✓ Calculations で元素分析 (MS での分子量なども)、NMR、水溶性などが予測
できる (アカウントは研究室では共有 OK)。
- ✓ 右上の Google マークで、その化合物の特許検索ができる
- ✓ 他の使い方リンクの例

<https://tech.patcore.com/entry/2020/10/14/150554>