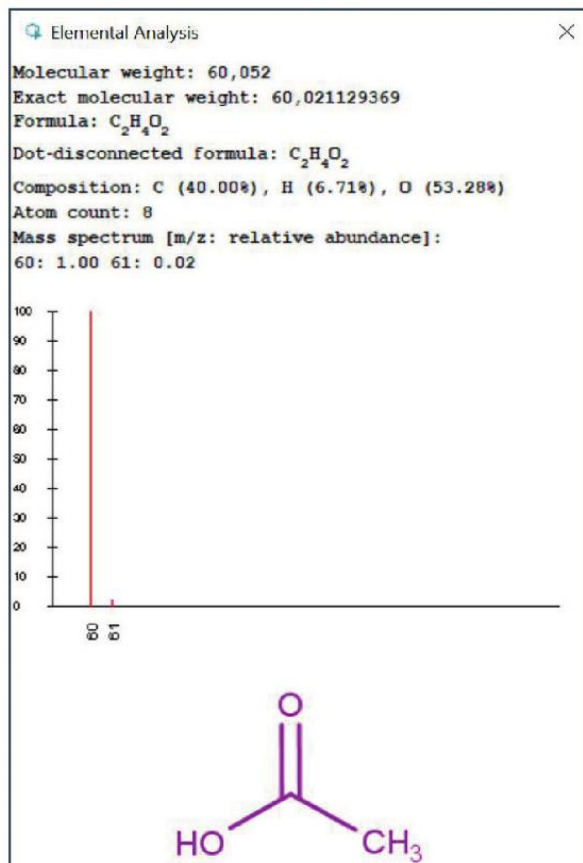




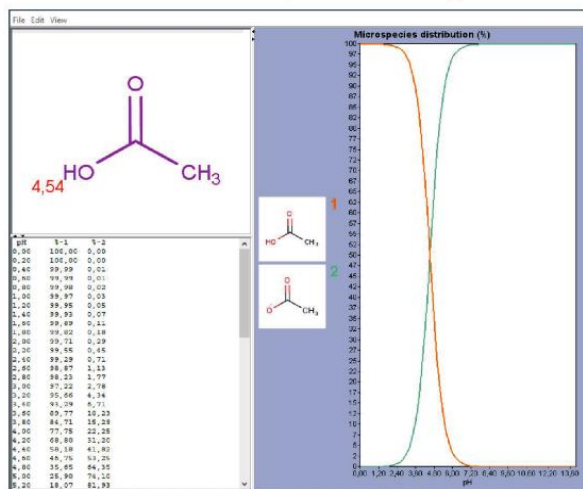
Fortsetzung: Marvin Beans

Massenzusammensetzung („Composition“) und die Anzahl der Atome abgerufen werden.



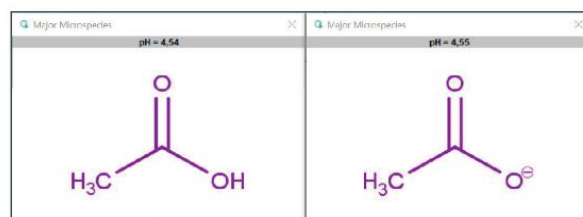
„Protonation“ → pKa

Mit dieser Programmfunktion können pKa-Werte berechnet werden (oftmals geringfügige Abweichungen zu den experimentell bestimmten Werten). Außerdem ist eine Darstellung der prozentual abgegebenen Protonen bei verschiedenen pH-Werten möglich.



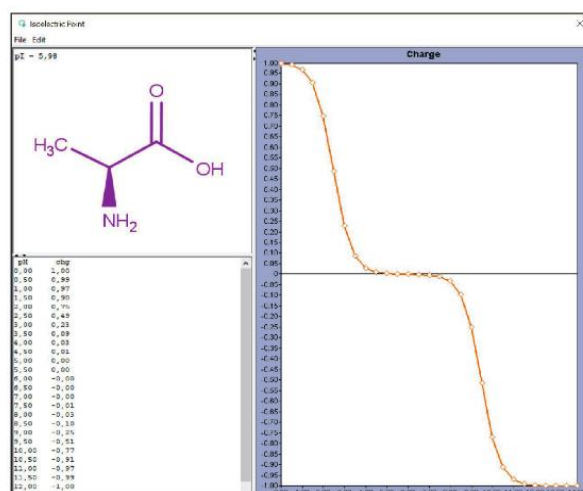
Major Microspecies

Mit diesem Tool kann von einer gezeichneten Struktur die Form berechnet werden, die bei einem bestimmten pH-Wert mit größerem Anteil (> 50 %) vorkommt. Dabei muss beachtet werden, dass bei der Eingabe des pH-Werts mit Dezimalzahlen statt einem Komma ein Punkt zu verwenden ist.



Isoelectric Point

MarvinSketch kann von Molekülen den isoelektrischen Punkt berechnen, z.B. von Aminosäuren.



„Partitioning“

Mit diesem Tool kann die Mischbarkeit/Löslichkeit prognostiziert werden. Mit $\log P$ wird der Oktanol-Wasser-Verteilungskoeffizient bestimmt. Das $\log D$ Tool berücksichtigt zusätzlich die Möglichkeit, dass eine Verbindung in verschiedenen Protonierungsstufen vorliegen kann. Das bedeutet, dass hier ein einstellbarer pH-Wert berücksichtigt wird.

„Charge“

Diese Programmfunktion ermöglicht eine Berechnung der Partialladungen. Die verschiedenen Ladungen werden über die Hartree-Energie wiedergegeben. Mit einem Rechtsklick auf die Abbildung kann die Darstellungsform verändert werden.

