


Basismodul: MarvinSketch

Die Oberfläche

Die große weiße Fläche ist die Arbeitsfläche, auf der Verbindungen erstellt werden können. Um die Arbeitsfläche ordnen sich verschiedene Werkzeugleisten an, die einen Schnellzugriff auf die wichtigsten Funktionen bieten:

- Rechts: Periodensystem () und darunter Schnellzugriff auf wichtige Elemente
- Links: Zeichen-Werkzeugleiste
- Oben: Allgemeine Werkzeug-Leiste
- Unten: Vorgefertigte Verbindungen für den Schnellzugriff (sogenannte Templates)

Erste Einstellungen

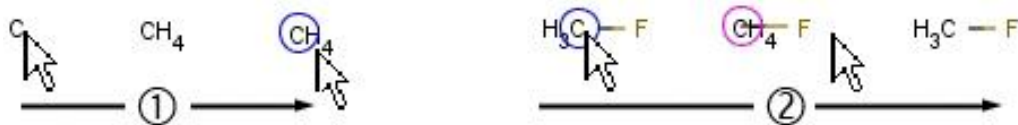
MarvinSketch zeigt standardmäßig nach dem Start nicht alle Wasserstoff-Atome an, da es aber sinnvoller ist diese zu sehen stellt die über **View -> Implicit Hydrogens** auf „On All“.


Das Erstellen einer Verbindung

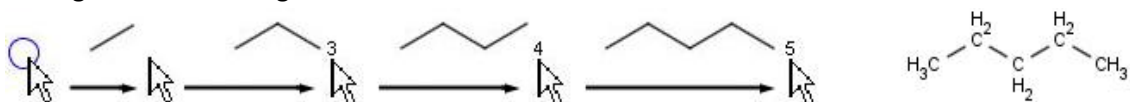
Durch das Anklicken eines Atoms aus der Periodensystem-Leiste (PSE) klebt dieses am Mauszeiger und kann mit einem weiteren Klick auf der Arbeitsoberfläche abgelegt werden ①

- ⇒ MarvinSketch ergänzt automatisch soviele Wasserstoffatome wie nötig sind, damit die Oktettregel erfüllt ist, z.B. ergibt das Ablegen eines C-Atomes ergibt automatisch CH_4 .


Die automatisch eingefügten Wasserstoffatome verschwinden automatisch, sobald du ein anderes Atom anfügst. Dazu wählst du über das PSE das gewünschte Atom aus, z.B. Fluor (F) und fährst mit dem Mauszeiger über die gezeichnete Verbindung, drückst die linke Maustaste und ziehst das Atom in eine Richtung weg, danach lässt du die linke Maustaste los ②.

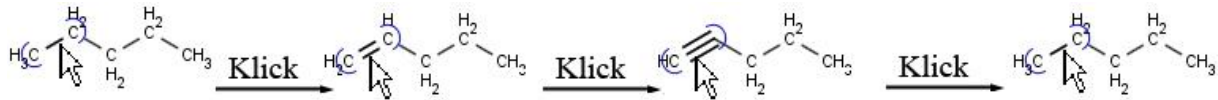


Um längere Kohlenstoffketten zu ziehen, ist das Werkzeug  praktisch, dadurch wird die Kette so lange wie du sie bei gedrückter linker Maustaste ziehst.




Bindungen verändern

Um Doppelbindungen oder Dreifachbindungen zu erstellen reicht es die bestimmte Bindung so oft anzuklicken bis die gewünschte Bindung erreicht ist. Alternativ kannst du auch links beim Bindungswerkzeug () durch einen Klick auf den Pfeil die richtige Bindung auswählen und anschließend auf die Bindung klicken, die du verändern willst.




Bindungen zwischen 2 einzelnen Verbindungen herstellen

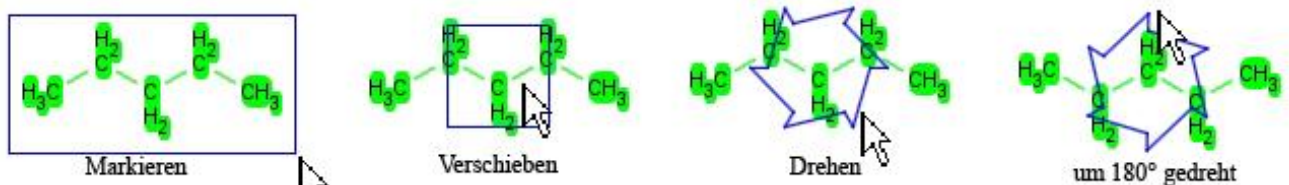
Um zwei voneinander getrennte Verbindungen miteinander zu verbinden, wählst du das Bindungswerkzeug  aus und ziehst unter gedrückter linker Maustaste die Bindung vom 1. Bindungspartner zum 2. Bindungspartner.



Automatische Berichtigung der Bindungslängen und Winkel

Wenn du die Verbindung aus Versehen etwas verzogen hast, so dass einige Bindungen und Winkel falsch sind, dann hilft dir MarvinSketch über **Structure** -> **Clean 2D** -> **Clean in 2D**

Löschen, Kopieren, Einfügen, Verschieben, Drehen

Mit dem Auswahlwerkzeug () links oben kannst du einen Rahmen über eine Verbindung oder auch nur einzelne Bestandteile einer Verbindung ziehen während du die linke Maustaste gedrückt hältst. Markierte Objekte sind grün gefärbt. Du kannst diese Objekte drehen bzw. verschieben, wenn du den Mauszeiger ungefähr in die Mitte fährst und dann die linke Maustaste drückst und gedrückt hältst bis du fertig bist mit dem verschieben.





Markierte Objekte kannst du außerdem über Kopieren  und Einfügen  woanders nochmal einfügen (z.B. auch in Word oder ein weiteres Mal auf die Arbeitsfläche). Wenn du ein markiertes Objekt löschen willst klicke auf die Schere oder ENTF auf der Tastatur

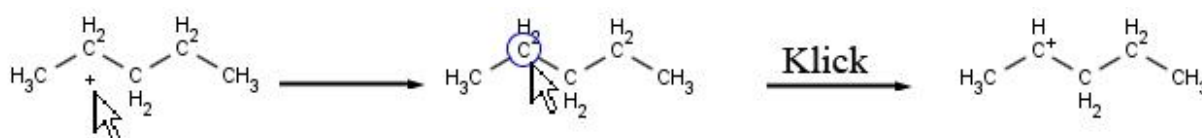
Verändern einzelner Atome in einer Verbindung

Du kannst einzelne Atome jederzeit ändern, indem du ein entsprechendes anderes Atom im PSE auswählst und anschließend auf das zu ändernde Atom klickst.

Tipp: Wenn du besonders schnell arbeiten willst kannst du auch Atome über die Tastatur auswählen, indem du das Atomsymbol eingibst, z.B. „cl“ für Chlor „o“ für Sauerstoff.

Ladungen verändern

Wenn du Ionen erstellen willst, dazu klickst du auf das  oder  am linken Rand und anschließend auf das Atom, das eine positive oder negative Ladung tragen soll.



Darstellungsoptionen verändern

Wenn du willst, dass alle Wasserstoffatome mit einer eigenen Bindung angezeigt werden, dann markiere ein Objekt und klicke auf **Structure -> Add -> Add explicit hydrogens**

Modul: MarvinView3D

Das Programm MarvinView3D öffnest du – nachdem du nachdem du in MarvinSketch eine Verbindung erstellt hast über die Menüleiste **View -> Open MarvinView3D** um eine Struktur z.B. als Kugel-Stab-Modell oder in einigen anderen 3D-Varianten darzustellen.

Wichtiger Hinweis zur Darstellung:

Um eine korrekte 3D-Darstellung der Wasserstoffatome zu erhalten, ist es wichtig, dass du VOR dem Öffnen des 3D-Viewers in MarvinSketch einstellst, dass alle Wasserstoffatome mit eigener Bindung dargestellt werden (explizite Darstellung in MarvinSketch: **Structure -> Add -> Explicit Hydrogens**)

Alternativ kannst du auch noch nach dem Öffnen des Viewers eine korrekte Darstellung erhalten, wenn du in MarvinView3D über **Edit -> Add -> Explicit H Atoms** einstellst und danach **Edit -> Clean -> 3D -> Clean in 3D** um die Winkel und Längen der Bindung nachträglich zu korrigieren.

Die Einstellungsmöglichkeiten der Darstellung

Nach dem Öffnen des Viewers erhältst du eine Ansicht eines Stäbchenmodells in 3D, die Ansicht kannst du ändern, indem du im Menü unter **View -> Display** die entsprechende Darstellung auswählst, z.B. „ball and stick“ für eine Kugel-Stab-Darstellung.

Anzeigen verschiedener Informationen an der Struktur

Über **View -> Misc** (miscellaneous: Diverses) kannst du über sog. Checkboxes () kannst du auswählen welche Anzeigen dargestellt werden sollen. Wichtig sind dabei vor Allem: „lone pairs“ (Anzeige freier Elektronenpaare), E/Z-Labels (Anzeige der E/Z-Isomerie bei Doppelbindungen, falls vorhanden), bond lengths (Bindungslängen), R/S-labels (Anzeige der R/S-Isomerie bei Chiralität)

Drehen, Vergrößern, etc. der Struktur

Um eine Verbindung zu drehen, ziehst du den Mauszeiger bei gedrückter linker Maustaste über die MarvinView Oberfläche. Je nachdem was du bei **View -> Transform** eingestellt hast, verhält sich die Drehung anders. Am besten probierst du die Möglichkeiten einmal durch. Im gleichen Menü findest du auch die Möglichkeit die Struktur zu vergrößern oder zu verkleinern (**Zoom**), das funktioniert nach der Auswahl über das Ziehen des gedrückten Mauszeigers über die Oberfläche von MarvinView3D.

Der Vergleich mehrerer Strukturen in 3D

Leider klappt es nicht mehrere Verbindungen in einem MarvinView3D Fenster separat voneinander zu drehen, so dass ein Vergleich meistens kaum möglich ist, wenn man diese nicht in eine ähnliche Position drehen kann.

Um das zu umgehen, musst du jede Verbindung, die du vergleichen willst in einem eigenen MarvinSketch-Fenster erstellen und von dort aus jeweils ein MarvinView3D Fenster öffnen und diese nebeneinander ziehen, so hast du z.B. beim Vergleich von 3 Verbindungen 3 MarvinSketch Fenster und 3 MarvinView3D Fenster. Um ein neues MarvinSketch Fenster zu öffnen gehst du auf **File -> New -> New Window**.

Modul MarvinSpace

Das Programm MarvinSpace öffnest du über **View -> MarvinSpace**. Die Programmoberfläche ist sehr schlicht gehalten und dadurch sehr übersichtlich. Sämtliche Funktionen befinden sich in einem Kontextmenü, das du durch einen Rechtsklick auf die Arbeitsoberfläche von MarvinSpace erreichst.

Wichtiger Hinweis zur Darstellung

Um eine korrekte 3D-Darstellung der Wasserstoffatome zu erhalten, ist es wichtig, dass du VOR dem Öffnen von MarvinSpace in MarvinSketch einstellst, dass alle Wasserstoffatome mit eigener Bindung dargestellt werden (explizite Darstellung in MarvinSketch: **Structure -> Add -> Explicit Hydrogens**)

Ein nachträgliches Hinzufügen von Wasserstoffatomen in MarvinSpace ist zwar möglich, führt aber nicht zu einer korrekten Darstellung der Bindungswinkel.

Die Einstellungsmöglichkeiten der Darstellung

MarvinSpace ermöglicht alle gängigen Darstellungsformen von Strukturen, z.B. das Kugel-Stab-Modell (ball and stick) und das Kalottenmodell (spacefill). Die Ansichten kannst du über das **Kontextmenü** (Rechtsklick) -> **Draw Type** ändern.

Drehen, Vergrößern, etc. der Struktur

Zum Drehen fährst du einfach mit der Maus auf die Verbindung, und ziehst die Maus während du die linke Maustaste drückst über die Arbeitsoberfläche. Zum Rotieren der Verbindung drückst du die Maustaste weit außerhalb der Struktur und ziehst sie über die Arbeitsoberfläche.

Zum Vergrößern fährst du mit der Maus auf und ab, während du die mittlere Maustaste (bzw. das Mousrad) gedrückt hältst.

Der Vergleich mehrerer Strukturen in 3D

Leider klappt es nicht mehrere Verbindungen in einem MarvinSpace Fenster separat voneinander zu drehen, so dass ein Vergleich meistens kaum möglich ist, wenn man diese nicht in eine ähnliche Position drehen kann.

Um das zu umgehen, musst du jede Verbindung, die du vergleichen willst in einem eigenen MarvinSketch Fenster erstellen und von dort aus jeweils ein MarvinSpace Fenster öffnen und diese nebeneinander ziehen, so hast du z.B. beim Vergleich von 3 Strukturen 3 MarvinSketch Fenster und 3 MarvinSpace Fenster. Um ein neues MarvinSpace Fenster zu öffnen gehst du auf **File -> New -> New Window**.

Veränderungen an der Struktur

MarvinSpace aktualisiert die Verbindung in seiner Ansicht bei jeder Veränderung der Verbindung in MarvinSketch, d.h. du kannst das MarvinSketch und das MarvinSpace Fenster nebeneinander stellen und während du in MarvinSketch etwas veränderst sofort die 3D-Struktur beobachten.

Modul: Löslichkeiten

Mit MarvinSketch lässt sich für eine erstellte Verbindung berechnen wie stark sich diese in Wasser bzw. Butanol lösen.

Der errechnete Wert (logP) stellt dabei ein Verhältnis der Löslichkeiten in beiden Lösungsmitteln dar:

Grob gesagt ist ein Stoff mit einem hohen logP-Wert besser in Butanol löslich und mit einem niedrigen logP-Wert besser in Wasser.

Das Starten des Werkzeuges

Nach dem Zeichnen einer oder mehrerer Verbindungen öffnest du über **Tools** -> **Partitioning** -> **logP** ein Fenster mit den Optionen der Berechnung. Dort solltest du nichts verändern, es sei denn dein Lehrer erwähnt es explizit. Wenn du dir nicht sicher bist, ob bereits durch Vorgänger etwas verstellt wurde, klicke einfach auf den Button **Restore Defaults** und bestätige die Einstellungen mit **Ok**.

Danach öffnet sich ein Fenster mit einer 3D-Anzeige aller auf deiner Arbeitsoberfläche befindlichen Verbindungen, die du frei drehen kannst, wenn du mit der gedrückten linken Maustaste über einen Teil der schwarzen Oberfläche fährst.

Im linken oberen Bereich befindet sich jeweils die Anzeige des errechneten logP-Wertes.

Veränderung der Darstellung

Über einen Rechtsklick auf die Arbeitsoberfläche öffnest du ein Kontextmenü, über das du einerseits die Darstellung der Verbindung selbst ändern kannst (z.B. vom Kugel-Stab-Modell zum Stäbchenmodell), indem du im Kontextmenü auf **Molecule** gehst und die entsprechende Darstellung wählst, z.B. balls and stick (Kugel-Stab-Modell)

Andererseits kannst du auch die Darstellung der Elektronenverteilung um die Verbindung ändern, indem du im Kontextmenü auf Surface gehst und dort zwischen **solid** (fest), **transparent**, **mesh** (Drahtgitter), **dot** (gepunktet)

Die Farbgebung der Oberfläche basiert auf der unterschiedlich starken Anziehung von Elektronen einzelner Atome innerhalb der Verbindung.

Modul: Nomenklatur

MarvinSketch kann für (fast) jede Verbindung auf der Arbeitsoberfläche einen systematisch richtigen Namen erstellen. Die IUPAC Nomenklatur gilt zwar prinzipiell international für alle, damit auch der Chemiker in Schweden weiß, was du für eine Verbindung meinst, allerdings gibt es leider auch national kleine Unterschiede.

Da MarvinSketch nach englischsprachigen Standards erstellt wurde, werden diese auch in den erstellten Namen vorkommen. Die Änderungen selbst sind minimal und werden weiter unten aufgelistet

Die automatische Benennung einer Verbindung

Nach dem Erstellen einer oder mehrerer Verbindungen in MarvinSketch kannst du diese über **Tools** > **Naming** benennen lassen. Das Optionen-Fenster das dadurch aufgeht lässt dir die Wahl ob du den systematischen Namen (**preferred IUPAC name**) oder den geläufigen Trivialnamen (**traditional name**), sofern vorhanden, erstellen willst. In der Regel ist der systematische Name der Gesuchte!

Den „**single fragment mode**“ lässt du am Besten angeschaltet, wenn sich mehrere Verbindungen auf deiner Arbeitsoberfläche befinden, die du alle einzeln benannt haben willst. Ausgeschaltet wird dieser im Prinzip nur, wenn es sich um die zu benennende Verbindung um ein Salz handelt ($\text{Na}^+ \text{Cl}^-$), also sich auf der Arbeitsoberfläche zwar 2 verschiedene Ionen befinden, diese aber prinzipiell zusammengehören.

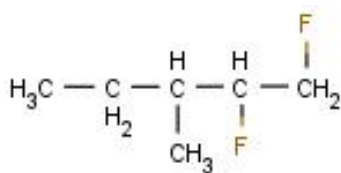
Die Struktur aus dem Namen

Über Edit -> Import Name kannst du aus einem erstellten (auch mit dt. Abweichungen) Namen die Struktur erstellen lassen. Das ist ideal um erarbeitete Namen zu überprüfen.

Einige Unterschiede der englischsprachigen Nomenklatur zur dt. Nomenklatur

- Im Englischen wird an viele Bestandteile des Namens noch ein „o“ oder „e“ angehängt, so wird z.B. aus 1,2 Difluorethan ein 1,2 Difluoroethane
 - ⇒ Aus Ethan wurde Ethane
 - ⇒ Aus Fluor wurde Fluoro
- Einige Namen enthalten statt einem „k“ ein „c“, so wird z.B. aus „oktan“ im englischen „octane“
- Alkine enden auf „yne“ statt auf „in“

Prinzipiell sollten die Unterschiede zum Üben kein allzu großes Problem sein, denn wenn du



diese Verbindung (hoffentlich) „1,2-Difluor-3-methylpentan“ nennst, dann erstellt MarvinSketch daraus „1,2-difluoro-3-methylpentane“. Also ein nur geringer Unterschied, während das prinzipielle Gerüst stimmt.

Modul: Elektronegativitäten

Atome haben unterschiedlich starke Anziehung auf Elektronen. In einer Verbindung aus verschiedenen Atomen ergeben sich daher teilweise gewaltige Unterschiede in der Anziehung. Diese Unterschiede haben massive Einflüsse auf die Eigenschaften einer Verbindung.

Wichtiger Hinweis zur Darstellung:

Um eine korrekte 3D-Darstellung der Wasserstoffatome zu erhalten, ist es wichtig, dass du VOR dem Öffnen von MarvinSpace in MarvinSketch einstellst, dass alle Wasserstoffatome mit eigener Bindung dargestellt werden (explizite Darstellung in MarvinSketch: **Structure** -> **Add** -> **Explicit Hydrogens**)

Die Berechnung der unterschiedlichen Elektronenanziehungen wird durch eine falsche Darstellung zwar nicht beeinflusst, aber eine korrekte Darstellung ist natürlich wünschenswert.

Das Darstellen der unterschiedlichen Elektronenanziehung

Um die Darstellung zu erreichen, klickst du auf **Tools** -> **Charge** -> **Charge**, danach öffnet sich sofort ein Fenster, in dem befindet sich für jede auf deiner Arbeitsoberfläche befindliche Verbindung eine Darstellung als Kugel-Stab-Modell und rechts daneben als eine Art Kalottenmodell mit Einfärbungen, die die unterschiedliche Elektronenanziehung symbolisieren.

In der Standardeinstellung wird dabei im rechten Bereich ein Verlauf von Rot nach Blau angezeigt, wobei rot das elektronegativere Atom darstellt und blau das elektropositivere Atom.

In der linken Darstellung siehst du dagegen an jedem Atom eine Beschriftung mit der relativen Elektronenanziehung zueinander, der kleinere (negativere) Wert zieht dabei die Elektronen mehr an.

Veränderung der Darstellung

Über einen Rechtsklick auf die Arbeitsoberfläche öffnest du ein Kontextmenü, über das du einerseits die Darstellung der Verbindung selbst ändern kannst (z.B. vom Kugel-Stab-Modell zum Stäbchenmodell), indem du im Kontextmenü auf **Molecule** gehst und die entsprechende Darstellung wählst, z.B. balls and stick (Kugel-Stab-Modell)

Andererseits kannst du auch die Darstellung der Elektronenverteilung um die Verbindung ändern, indem du im Kontextmenü auf Surface gehst und dort zwischen **solid** (fest), **transparent**, **mesh** (Drahtgitter), **dot** (gepunktet)

Außerdem kannst du noch den Farbverlauf anders darstellen lassen, indem du im Kontextmenü auf **palette** gehst und dort eine andere Farbgebung wählst.

Modul: Stereo-Isomerie

MarvinSketch kann an einer Verbindung selbstständig erkennen, ob es davon Stereo-Isomere gibt. Dabei unterscheiden wir zwischen E/Z-Isomeren an Doppelbindungen und den R/S-Isomeren.

Wichtiger Hinweis

Vor der Erstellung der Isomere solltest du alle Wasserstoffatome mit eigener Bindung (explizit) darstellen lassen, da diese sonst in der 3D-Darstellung nicht angezeigt werden. Das erreichst du in MarvinSketch durch **Structure -> Add -> Add explicit hydrogens**

Erstellen des zweiten Isomers (und Darstellung in 3D)

Nachdem du auf deiner Arbeitsoberfläche (mindestens) eine Verbindung mit Stereoisomerie vorliegen hast, kannst du über **Tools -> Isomers -> Stereoisomers** und einem Klick auf **Ok** für jede Verbindung ein Fenster öffnen lassen, indem nebeneinander eine drehbare 3D-Darstellung beider Isomere nebeneinander steht

Änderungen der Darstellung

Über **View -> Display** ist es dir möglich verschiedene 3D-Darstellungen deiner Isomere durchzuschauen. Vielleicht fällt es dir leichter die Isomerie zu sehen und zu bestimmen, wenn du eine andere Darstellung wählst.

Drehung der Darstellung

Um festzustellen welches Isomer nach der CIP-Regel vorliegt, ist es üblich den Substituenten mit der niedrigsten Priorität nach hinten zu drehen und dann zu bestimmen in welcher Reihenfolge die anderen Substituenten stehen.

Um den Substituenten mit der niedrigsten Priorität nach hinten zu drehen, kannst du mit der Maus während du die linke Maustaste gedrückt hältst über die Oberfläche fahren. Dabei dreht sich die Verbindung mit. Über **View -> Transform** hast du weitere Drehmöglichkeiten zum Durchprobieren, in der Regel sollte aber „**Transform in 3D**“ vollkommen ausreichen.

Anzeige welches Isomer auf welcher Seite vorliegt

Über **View -> Misc -> E/Z labels** bzw. **R/S labels** kannst du dir anzeigen lassen, welches Isomer du jeweils auf einer Seite hast und damit z.B. überprüfen ob du richtig bestimmt hast.

Anzeige des energetisch günstigeren E/Z-Isomers

Über **table -> show fields** kannst du dir anzeigen lassen welches der beiden E/Z Isomere energetisch günstiger ist. Für beide wird eine Energie angegeben. Das Isomer mit der niedrigeren Energie ist stabiler.

Modul: pKa/pKs

Der pKa/pKs-Wert hilft uns abzuschätzen, ob eine Verbindung sauer (Abgabe eines Protons) oder basisch (Aufnahme eines Protons) mit Wasser reagiert.

Mit MarvinSketch lässt sich an Hand der chemischen Eigenschaften einer selbst erstellten Verbindung abschätzen ob diese eher sauer oder eher basisch reagiert. Das Programm gibt einen pKa/pKs-Wert aus. Wichtig ist dabei zu beachten, dass das Programm zwar oft sehr nahe an den experimentell messbaren Wert herankommt, dieser aber nie ganz exakt ist, beispielsweise berechnet MarvinSketch für die Essigsäure einen pKa/pKs-Wert von 4,54, tatsächlich liegt er allerdings bei 4,75. Die Berechnung dient daher maximal einer Abschätzung.

Die Berechnung/Abschätzung durchführen

Du kannst den pKa/pKs-Wert für mehrere Verbindungen auf deiner Arbeitsoberfläche durchführen lassen. Jede Berechnung öffnet sich dann in einem neuen Fenster. Dadurch hast du die einfache Möglichkeit mehrere Verbindungen hinsichtlich ihrer Acidität zu direkt zu vergleichen.

Die Berechnung startest du über **Tools -> Protonation -> pKa** und einem anschließenden Klick auf **Ok** (In dem Fenster kannst du Einstellungen verändern, die normal nicht verändert werden müssen, wenn du dir aber nicht sicher bist ob etwas verstellt wurde, klicke einfach auf **Restore defaults**)

Das Ergebnisfenster

Das Ergebnisfenster ist dreigeteilt. Links oben befindet sich die Summenformel der Ausgangsverbindung mit darunter stehendem pKa/pKs-Wert in blau. Da drunter befindet sich eine tabellarische Auflistung, wie viel Prozent der protonierten und deprotonierten Form bei welchem pH-Wert vorhanden sind.

pH	%-1	%-2
pH-Wert	Anteil der Verbindung 1	Anteil der Verbindung 2

Verbindung 1 und Verbindung 2 sind direkt daneben einsehbar, in der Regel ist Verbindung 1 die ursprünglich auf der Arbeitsoberfläche erstellte Verbindung und Verbindung 2 die protonierte bzw. deprotonierte Form.

Ganz rechts ist eine graphische Auflistung des prozentualen Anteils der Verbindungen 1 und 2. Die Farbe der Kurven entspricht dabei den Farben der Zahlen neben den angezeigten Verbindungen.

Der Schnittpunkt der beiden Kurven (und damit der pKa/pKs) befindet sich dort, wo 50% beider Verbindungen vorkommen.

Kleinere pH-Schritte einstellen

Du kannst im Optionen-Fenster nach **Tools -> Protonation -> pKa** den „pH step size“ größer oder kleiner stellen um mehr oder weniger Zwischenschritte in der Berechnung einzusetzen. Der Wert des **pH step size** muss dabei mit einem Punkt angegeben werden, also z.B. 0.2 statt 0,2.

Modul: Isoelektrischer Punkt

Sogenannte Zwitterionen können mit einer ihrer Gruppen Protonen aufnehmen und mit einer anderen Gruppe Protonen abgeben, besonders bekannt ist dies bei Aminosäuren, dort sagt bereits der Name, dass dort mindestens eine Aminogruppe und eine Säuregruppe vorhanden sind. Diese Verbindungen sind bei bestimmten pH-Werten insgesamt elektrisch neutral, also die Säuregruppe wurde z.B. deprotoniert und die Aminogruppe protoniert, so dass sich die positive Ladung und die negative Ladung insgesamt ausgleichen.

Der pH-Wert an dem dieser Zustand eintritt nennt sich isoelektrischer Punkt und ist ein wichtiger Wert zur Bestimmung von Aminosäuren.

Wichtig ist dabei, dass der berechnete Wert eine Abschätzung ist und nicht exakt dem experimentell ermittelten Wert entsprechen muss, aber in der Regel nahe ran kommt.

Die Bestimmung des isoelektrischen Punktes

Über **Tools** -> **Protonation** -> **Isoelectric Point** kannst du die Berechnung für das auf der Arbeitsoberfläche befindliche Zwitterion starten.

Das Ergebnisfenster ist dreigeteilt. In der oberen linken Ecke befindet sich die Verbindung, für die der isoelektrische Punkt berechnet wurde zusammen mit dem ermittelten Wert. Direkt darunter befindet sich eine Wertetabelle mit der Ladung der Verbindung bei verschiedenen pH-Werten.

Rechts sind die Werte in einem Graph dargestellt. Beim Überfahren der Vierecke kann der entsprechende pH-Wert und die entsprechende Ladung abgelesen werden.

Kleinere pH-Schritte einstellen

Du kannst im Optionen-Fenster nach **Tools** -> **Protonation** -> **Isoelectric Point** den „**pH step size**“ größer oder kleiner stellen um mehr oder weniger Zwischenschritte in der Berechnung einzusetzen. Der Wert des **pH step size** muss dabei mit einem Punkt angegeben werden, also z.B. 0.2 statt 0,2.