

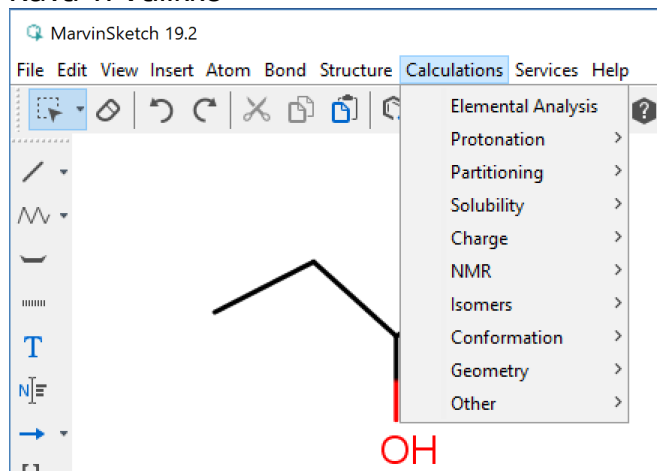
MarvinSketch 6 – MarvinSketch ja molekyylin analysointi

7.4.2019

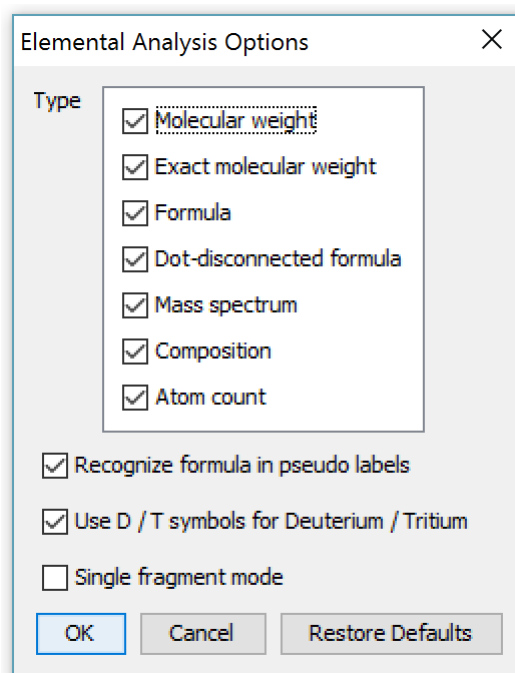
MarvinSketch-ohjelmalla voidaan tuottaa molekyylin perustietoja Calculations -valikosta.

Calculations -kohdasta tulee alasvetovalikko, jossa voidaan tuottaa erilaisia tietoja molekyylistä. Ns. ei-lisenssiversiossa ainoastaan Elemental Analysis -osio toimii.

Kuva 1. Valikko

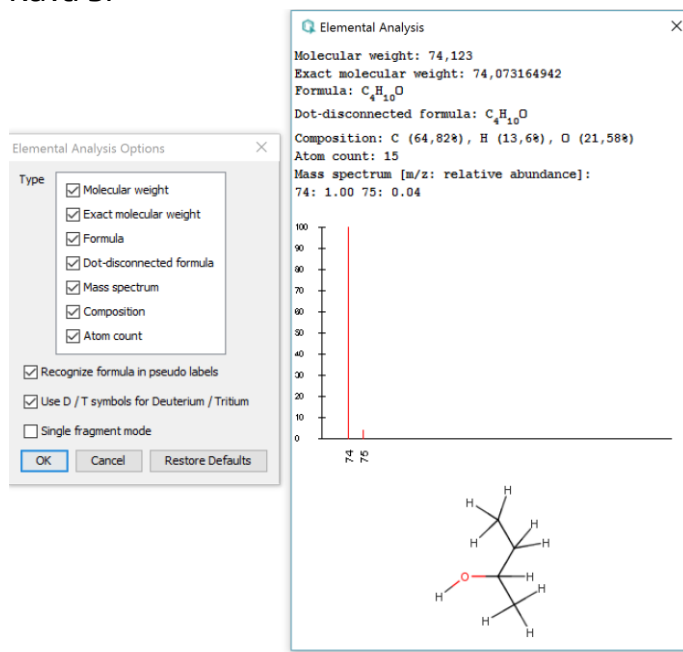


Kuva 2. Preferences-kohta



Preferences-kohdassa voidaan määritellä mitä asioita Calculations | Elemental Analysis -valinta tuo ikkunaan.

Kuva 3.



Molekyylin analysointi tuottaa moolimassan lisäksi tarkan moolimassan, molekyylikaavan, alkuainekoostumuksen ja massaspektrin.

Massaspektrin tulkinnasta omassa kohdassa.