

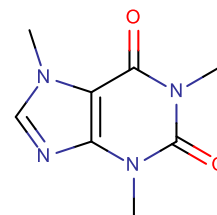
Indhold

Hvordan får man vist alle C- og H-atomer i en kemisk struktur?	2
Indstilling for C-atomer.....	2
Indstilling for H-atomer	2
Hvordan tegnes en aromatisk ring?	3
Hvordan bestemmes en pK_s værdi ved hjælp af Marvin Sketch?	3
Hvordan sættes lone pairs på en strukturformel?	4
Hvordan bestemmes en forbindelses molarmasse?	4
Hvordan bestemmes en forbindelses molekylformel?	4
Hvordan bestemmes en forbindelses sammensætning i masseprocent?	4
Hvordan ændres en strukturformel så man kan se ladninger i forbindelsen?.....	5
Hvordan bestemmes en forbindelses navn?	5
Hvordan tegnes en kemisk strukturformel ud fra et kendt navn?	5
Hvordan laves en boks med navn, molekylformel mm kan laves?	6
Hvordan vises cis-trans isomere forbindelser af en forbindelse?	6
Hvordan vises spejlbillede isomere forbindelser af en forbindelse?	7
Hvordan kan man markere et asymmetrisk C-atom i en forbindelse?	7
Hvordan ændres farverne på de viste atomer i en forbindelse?	7
Hvordan kan man markere et bestemt område i en kemisk forbindelse?.....	8
Hvordan skriver man en tekst ved en kemisk forbindelse?	8
Hvordan laves en graf for $\log D$'s afhængighed af pH?	9
Hvordan bestemmes P (fordelingskonstanten)?	9
Hvordan bestemmes H-donor henholdsvis H-acceptorer i en forbindelse?	10
Hvordan laves et H-NMR spektre af en forbindelse?.....	11

I det følgende gives nogle tips til brugen af Marvin Sketch. Version 18 er den benyttede version i eksemplerne, men de enkelte tips kan også bruges i andre versioner. Endvidere er materialet benyttet i forbindelse med en PC - det er ikke afprøvet på en Mac, så der kan være steder, hvor menuer mm ser lidt anderledes ud, hvis man er Mac bruger. Håbet er at følgende liste med tricks og tips kan hjælpe eleverne i deres brug af Marvin Sketch som et it-redskab, der skal give eleverne en bedre kemisk forståelse uden at ende som "trykke-på-knapper-kompetence". Endvidere vil det forhåbentlig være muligt at udvide listen, hvis der er flere faciliteter som bør beskrives.

Hvordan får man vist alle C- og H-atomer i en kemisk struktur?

Du kan sommetider have brug for at kunne se alle C- og H-atomer i en strukturformel. Det gøres på to forskellige steder for C- og H-atomer. Her er en beskrivelse af, hvorledes man gør for først C-atomer og dernæst H-atomer. Udgangspunktet er en strukturformel for coffein, som ses til højre.



Indstilling for C-atomer

I hovedmenuen vælges **Edit**

I menu vælges sidste punkt **Preferences**.

Nu åbnes en undermenu.

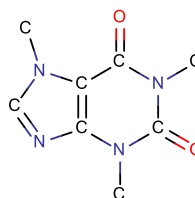
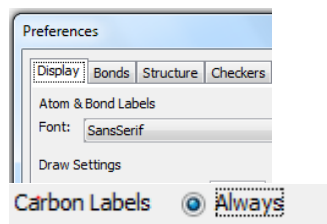
Vælg undermenuen **Structure**.

Under punktet "Carbon Labels" kan man nu vælge den ønskede indstilling. Default er "At straight angles and at implicit H atoms".

Vælges "**Always**" vises alle C-atomer.

Klik herefter på OK.

Alle C-atomer vises nu på strukturformlen.



Hvis man ønsker at fjerne muligheden for at vise C-atomerne igen, så vælges "**Never**" i menuen "Structure", som beskrevet ovenfor. Indstilling gælder, indtil man ændrer denne.

Indstilling for H-atomer

Der findes to måder, som kan benyttes til at vise H-atomerne i en strukturformel. Den ene viser H-atomerne i en "komprimeret" form ved C-atomerne, fx CH₃. Den anden metode viser alle bindinger mellem C- og H-atomer.

Visning af implicitte H-atomer i "komprimeret" form

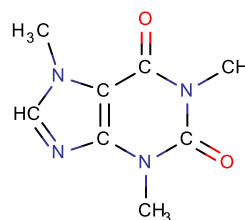
En forudsætning for at vise H-atomerne er, at C-atomerne er vist i strukturformlen, se ovenfor.

I hovedmenuen vælges **View**.

I menuen vælges punktet **Implicit Hydrogens**

Nu åbnes en undermenu.

Vælg i undermenuen **On All**. Herefter vises alle H-atomer. Der findes også andre mulige indstillinger. Man kan fjerne H-atomerne igen ved at vælge **Off**. Indstilling gælder, indtil man ændrer denne.



Visning af implicitte H-atomer i alle bindinger

En forudsætning for at vise H-atomerne er, at C-atomerne er vist i strukturformlen, se ovenfor.

I hovedmenuen vælges **Structure**

I menu vælges punktet **Add**

I undermenuen vælges **Explicit Hydrogens**

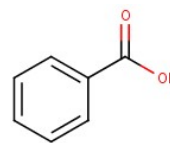
Man kan stille tilbage ved at vælge menupunktet

Remove, og derefter **Explicit Hydrogens**.

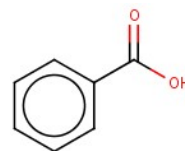


Hvordan tegnes en aromatisk ring?

Hvis man har en strukturformel, hvor man ønsker at tegne en aromatisk ring i stedet for standardindstillingen, kan dette gøres ved følgende fremgangsmåde:



- I hovedmenuen vælges **Structure**
- I menu vælges punktet **Aromatic Form**
- I undermenuen vælges **Convert to Aromatic Form**

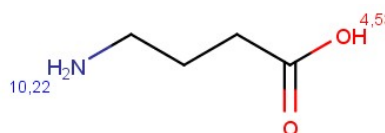


Man kan stille tilbage ved at vælge menupunktet **Kekulé to Aromatic Form**

Hvordan bestemmes en pK_s værdi ved hjælp af Marvin Sketch?

Man kan ved hjælp af Marvin Sketch bestemme beregnede syrestyrkeeksponenter, pK_s , for en syre, fx en carboxylsyre. Tilsvarende vil det også være muligt at bestemme basestyrkeeksponenter, pK_b , for en base, fx en amin. Dog skal man være opmærksom på, at for en base angives den beregnede pK_s værdi for den korresponderende syre til basen.

I MarvinSketch er en syregruppe markeret med rødt, mens en base vises med blå farve. I eksemplet til højre er carboxylsyrens pK_s beregnet til 4,53, og aminens korresponderende pK_s værdi 10,22. Derved bliver basens pK_b værdi 3,78. På engelsk betegnes pK_s med pK_a (a for acid).



Man skal dog være opmærksom på, at værdierne er beregnede og ikke eksperimentelt bestemt, og derfor kan variere en del fra tabelværdier, som fx findes i Databogen fysik/kemi. Hvis det er muligt at benytte eksperimentelt bestemte værdi, som fx givet i Databogen fysik/kemi, bør disse foretrækkes. Men kan sådanne eksperimentelle værdier ikke umiddelbart bestemmes, kan man benytte de beregnede fra MarvinSketch. Nogle kommer MarvinSketch med pK_s værdier for funktionelle grupper, som vi i gymnasiesammenhæng betragter som uden syre-base egenskaber. Fx hydroxygruppen i en alkohol (pK_s over 14). Man bør se bort fra denne type beregnede værdier ved brug i gymnasiesammenhæng.

Bestemmelse af en syres pK_s værdi

I hovedmenuen vælges **Calculations**
 I menu vælges punktet **Protonation**
 I undermenuen vælges herefter **pKa**
 Herved fremkommer en menu "pKa Options".
 Klik på Ok. Nu vises strukturformlen med en angivelse af pK_s med rødt.

Bestemmelse af en bases pK_b værdi

I hovedmenuen vælges **Calculations**
 I menu vælges punktet **Protonation**
 I undermenuen vælges herefter **pKa**
 Herved fremkommer en menu "pKa Options".
 Klik på Ok. Nu vises strukturformlen med en angivelse af pK_s for den korresponderende syre med blåt. Herefter benyttes formler til beregning af $pK_b = 14,00 - pK_s$.

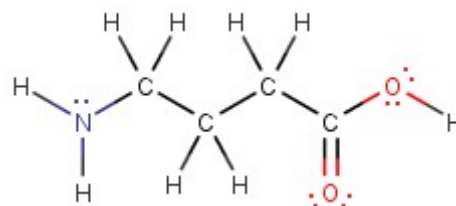
Hvordan sættes lone pairs på en strukturformel?

Lone pairs (ikke bindende elektronpar) kan vises på en strukturformel. Det typisk relevant for forbindelser, som indeholder oxygen- eller nitrogenatomer.

I hovedmenuen vælges **View**

I menu vælges punktet **Advanced**

I undermenuen vælges herefter **Lone pairs**



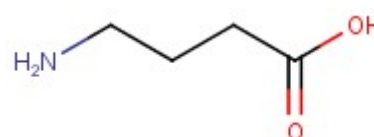
Hvordan bestemmes en forbindelses molarmasse?

I hovedmenuen vælges **Calculations**

I menu vælges punktet **Elemental Analysis**

I undermenuen sættes flueben ved **Molecular weight**

Tryk på **OK**



Elemental Analysis

Molecular weight: 103,121

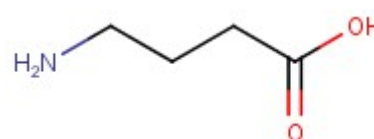
Hvordan bestemmes en forbindelses molekylformel?

I hovedmenuen vælges **Calculations**

I menu vælges punktet **Elemental Analysis**

I undermenuen sættes flueben ved **Formula**

Tryk på **OK**



Elemental Analysis

Formula: C₄H₉NO₂

Hvordan bestemmes en forbindelses sammensætning i masseprocent?

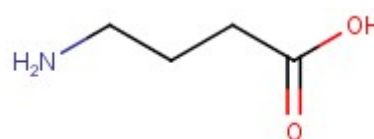
I hovedmenuen vælges **Calculations**

I menu vælges punktet **Elemental Analysis**

I undermenuen sættes flueben ved

Composition

Tryk på **OK**



Elemental Analysis

Composition: C (46.59%), H (8.80%), N (13.58%), O (31.03%)

Hvordan ændres en strukturformel så man kan se ladninger i forbindelsen?

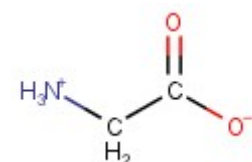
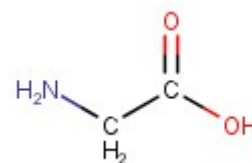
For en carboxylsyre (-COOH) eller en amin (fx en primær amin C-NH₂) vil man undertiden gerne tegne den korresponderende base henholdsvis korresponderende syre. Det kan gøres på følgende måde:

Først tegnes molekylet.

I den horisontale menu til venstre vælges **+**, hvis man vil øge ladningen (svarer til at binde et ekstra H-atom til det valgte atom). Hvis man vil mindske ladningen vælges **-** (svarer til at fjerne et H-atom).

Herefter klikkes på det atom, som skal have ændret ladning.

Hvis man vil fjerne ladningen igen, så vælges den modsatte ladning, og der klikkes på atomet igen.



Hvordan bestemmes en forbindelses navn?

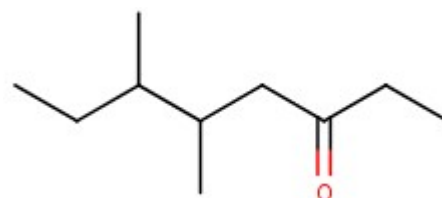
I hovedmenuen vælges **Structure**

I menu vælges punktet **Generate Name**

Der fremkommer herefter en undermenu, hvor der kan vælges mellem i) **Prefered IUPAC Name** og ii) **Traditional Name**.

I det konkrete tilfælde er de to navne ens. Det gælder dog ikke for alle kemiske forbindelser.

Husk at navne skal omdannes til dansk navne. Dvs. i det viste tilfælde 5,6-dimethyloctan-3-on.



5,6-dimethyloctan-3-one

(engelsk navn som skal omsættes til dansk)

Hvordan tegnes en kemisk strukturformel ud fra et kendt navn?

For en del kemiske forbindelser vil det være muligt ud fra navnet at få dannet en kemisk strukturformel.

I hovedmenuen vælges **Structure**

I menu vælges punktet **Name to Structure**

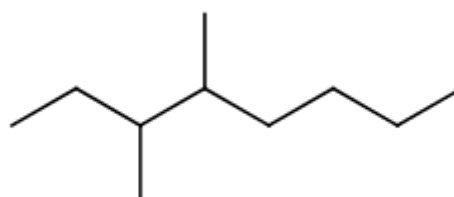
Der fremkommer herefter en boks, hvori man kan skrive det kemiske navn, og derefter trykkes på **Import**.

Det er også muligt at få boksen frem ved at bruge "Ctrl+Shift+N".

Undertiden kan danske navne bruges. Hvis ikke dette kan lade sig gøre, kan man prøve med navnet på engelsk fx skal der nogle gange bare tilføjes et "e" i enden af navnet.

Det er også muligt at bruge "traditionelle" navne, ikke kun systematiske navne. Fx kan man indtaste coffein i boksen (det hedder i øvrigt caffein på engelsk).

Eksempel: Navnet 3,4-dimethyloctan indtastes i boksen under **Name to Structure**. Herefter trykkes på **Import**, og strukturen fremkommer



Hvordan laves en boks med navn, molekylformel mm kan laves?

I hovedmenuen vælges **Structure**

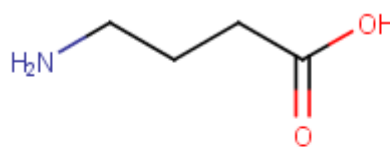
I menu vælges punktet **Place Analysis Box**

I undermenuen vælges **Convert to Aromatic Form**

Man kan også bruge **"Ctrl+I"**.

Indholdet i boksen kan stilles under Edit/Preferences - vælg herefter Analysis Box.

Husk at navne skal omdannes til dansk navne. Dvs. i det viste tilfælde 4-aminobutansyre.



Name: 4-aminobutanoic acid

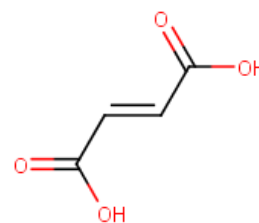
Molecular weight: 103,12

Formula: C₄H₉NO₂

Traditional name: gamma(amino)-butyric acid

Hvordan vises cis-trans isomere forbindelser af en forbindelse?

Hvis man har en kemiske forbindelse, som kan udvise cis-trans isomeri, dvs. stereoisomeri omkring en C=C-binding, er det muligt at dels finde dets isomere forbindelse og dels dets systematiske navn. Med hensyn til navngivning benytter MarvinSketch E/Z-navngivning (systematisk navngivning ifølge IUPAC). Navngivningen sker på almindeligvis, se ovenfor.



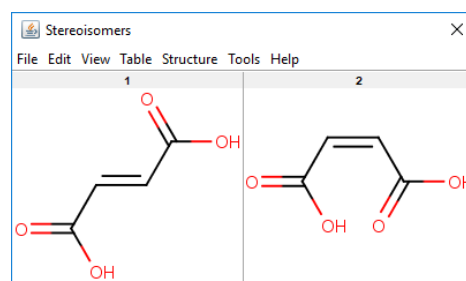
I hovedmenuen vælges **Calculations**

I menu vælges punktet **Isomers**

I undermenuen vælges **Stereoisomers**

I menuboksen, som fremkommer, vælges **double bond stereo isomers**.

Ovenstående forbindelses traditionelle navn er fumarsyre (på engelsk: fumaric acid). Dets systematiske navn er: (2E)-but-2-endisyre (på engelsk: (2E)-but-2-enedioic acid)



Forbindelsen til højre hedder (2Z)-but-2-endisyre (traditionelt navn er maleinsyre)

Hvordan vises spejlbillede isomere forbindelser af en forbindelse?

Hvis man har en kemiske forbindelse, som kan udvise spejlbilledisomeri (også kaldet optisk isomeri), dvs. stereoisomeri omkring et asymmetrisk C-atom, er det muligt at dels finde dets isomere forbindelse og dels dets systematiske navn. Med hensyn til navngivning benytter Marvin Sketch R/S-navngivning (systematisk navngivning ifølge IUPAC). Navngivningen sker på almindeligvis, se ovenfor.


I hovedmenuen vælges **Calculations**


I menu vælges punktet **Isomers**

I undermenuen vælges **Stereoisomers**

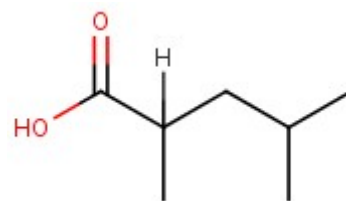
I menuboksen, som fremkommer, vælges **tetrahedral stereo isomers**.

I MarvinSketch benyttes følgende symboler til at vise den rumlige opbygning omkring det asymmetriske C-atom (der er tale om en normal standard for vise den rumlige opbygning):

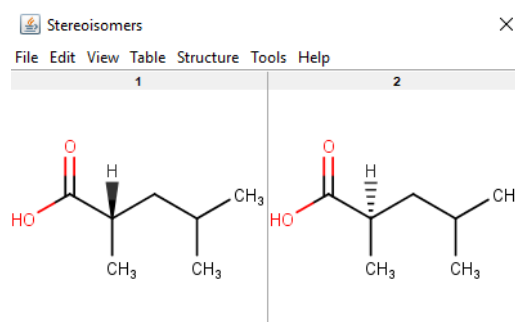
Symbolet  angiver en kemisk binding, som peger ud mod betragteren af den kemiske struktur, dvs. peger ud af "skærmens" plan.

Symbolet  angiver en kemisk binding, som peger væk fra betragteren af den kemiske struktur, dvs. peger ind i "skærmens" plan.

Hvis man selv ønsker at tegne en kemisk binding med en af symbolerne ovenfor, så kan man vælge disse under menupunktet for bindinger i menuen i venstre side af skærmbillede.



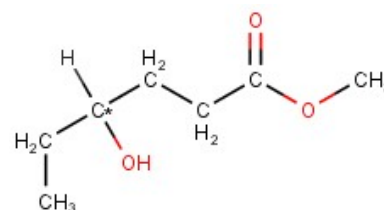
Ovenstående forbindelses systematiske navn er 2,4-dimethylpentansyre (på engelsk: 2,4-dimethylpentanoic acid). C-2 er et asymmetrisk C-atom.



Forbindelsen til højre hedder (2S)-2,4-dimethylpentansyre og til venstre (2R)-2,4-dimethylpentansyre.

Hvordan kan man markere et asymmetrisk C-atom i en forbindelse?

Et asymmetrisk C-atom (kiralt center) i en kemisk forbindelse kan angives ved en * ud for det pågældende C-atom. Det gøres ved at skrive en "tekst" med tegnet * og sætte det ved C-atomet. Hvordan man skriver teksten "*" fremgår af "Hvordan skriver man en tekst ved en kemisk forbindelse".



Hvordan ændres farverne på de viste atomer i en forbindelse?

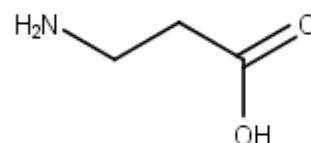
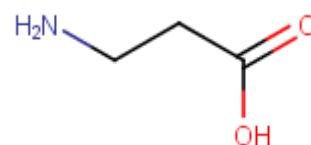
Det er muligt at skifte farver på atomerne i en forbindelse. Fx kan man sætte alle farverne til "sort". Som udgangspunkt vises grupper omkring oxygenatomer med rødt og omkring nitrogen med blå.

I hovedmenuen vælges **View**

I menu vælges punktet **Colors**

I undermenuen vælges **Monochrome**. Herved vises atomerne/atomrupperne med stor.

Farverne kan fås igen ved at vælge **CPK** i undermenuen.



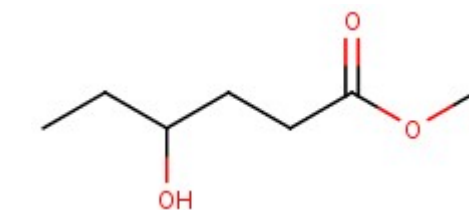
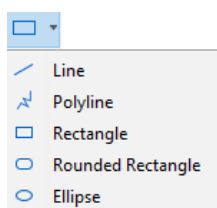
Hvordan kan man markere et bestemt område i en kemisk forbindelse?

Hvis man ønsker at markere et bestemt område i en kemisk forbindelse, fx en funktionel gruppe, kan det gøres ved at tegne en "ring" omkring området. Det er muligt at skifte farver på "ringen", fx hvis man har flere funktionelle grupper, som skal markeres i forbindelsen.

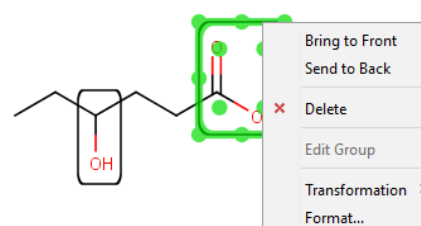
I menuen i venstre side af skærbillede vælges knappen for tegning af rektangler mm. Når menuen foldes ud ses forskellige geometriske figurer, som kan benyttes til markering på den kemiske struktur.

Vælg fx "Rounded Rectangle"

Hold musen nede og træk figuren ud rundt om det område, som ønskes markeret.

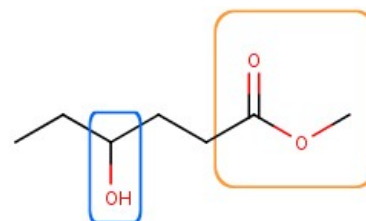


Man ønsker at markere de to funktionelle grupper i molekylet



Hvis rammens farve eller tykkelse ønskes ændret, højre klikkes på rammen, således at der fremkommer en "grøn" markering af rammen. Der fremkommer nu en menu "Graphics Object Properties":

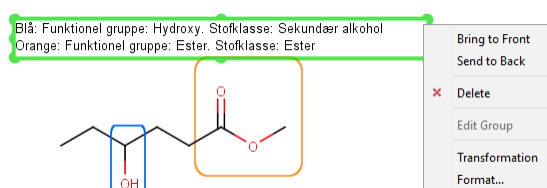
- Outline: benyttes til at ændre rammens farve eller tykkelse
- Background: benyttes til at ændre den geometriske figurs baggrundsfarve. Hvis man ændrer baggrundsfarven, kan man benytte "Send to Back" og "Bring to Front" for at få den visning af det markerede område, som ønskes.



Hvordan skriver man en tekst ved en kemisk forbindelse?

Hvis man ønsker at skrive en tekst i forbindelse med en kemisk struktur, vælges knappen **T** (text) i menuen i venstre side af skærbillede. Herefter markeres det område, hvori man ønsker at skrive sin tekst, og derefter skrives teksten inde i feltet.

Man kan ændre på skrifttype, størrelse og farve ved at køre musen over tekstfeltet til man ser en "grøn ramme". Herefter højreklikkes således man får en menu frem. I denne vælges "Format". I den fremkomne menu "Graphics Object Properties" kan man herefter ændre de ønskede størrelser i forbindelse med teksten.



Man ønsker at angive de to funktionelle grupper og tilhørende stofklasser i molekylet

Hvordan laves en graf for $\log D$'s afhængighed af pH?

Man kan få en beregnet graf for **fordelingsforholdet D** (eller egentlig $\log(D)$ - titalslogaritmen) afhængighed af pH.

$$D = \frac{c_A(\text{octan-1-ol})}{c_A(\text{aq})}$$

Man skal være opmærksom på, at der ikke er tale om en eksperimentelt bestemt sammenhæng, men om en simulation/beregning af sammenhængen.

I hovedmenuen vælges **Calculations**

I menu vælges punktet **Partitioning**

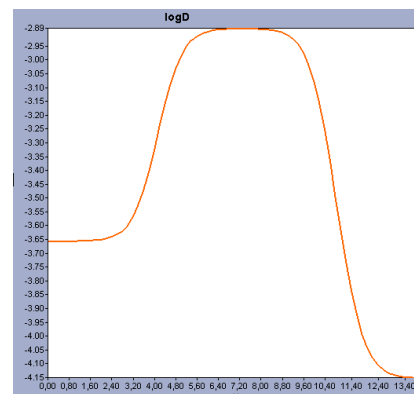
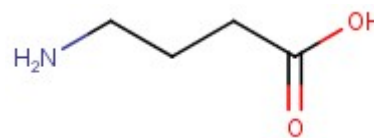
I undermenuen vælges **logD**

Herved fremkommer en menu "logD Options".

Klik på Ok.

Nu vises et vindue "logD" med grafen, samt data, som evt. kan kopieres til et regneark.

Ved brug af fanebladet "Display Options" menuen "logD Options" pH-interval for grafen angives.



Hvordan bestemmes P (fordelingskonstanten)?

Man kan få en beregnet værdi for fordelingskonstanten P for en forbindelse i et tofase system (fordeling mellem octan-1-ol og vand).

$$P = \frac{[A](\text{octan-1-ol})}{[A](\text{aq})}$$

Hvis en kemisk forbindelse kan være på forskellige former (fx en carboxylsyre), så kan det være en fordel at tegne den "ladet form", da MarvinSketch både vil beregne for den "uladet" og den "ladet" form af molekylet. Fordelingskonstanten P kaldes også for lipofiliteten og benævnes også med K_f .

MarvinSketch beregner ikke direkte P , men titalslogaritmen til P .

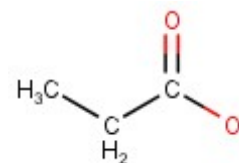
Man skal være opmærksom på, at der ikke er tale om en eksperimentelt bestemt sammenhæng, men om en simulation/beregning af sammenhængen.

I hovedmenuen vælges **Calculations**

I menu vælges punktet **Partitioning**

I undermenuen vælges **logP**

Herved fremkommer et nyt vindue med forbindelsen. LogP kan aflæses i øverst venstre hjørne i vinduet til venstre. Hvis forbindelsen findes i en "uladet" og en "ladet" form, vil der være flere værdier, se evt. eksemplet til højre.



Propanoat, korresponderende base til propansyre.

logP

logP of ionic species = -3,05
logP of nonionic species = 0,48

$$\log P_{\text{ionisk forbindelse}} = \log \left(\frac{[\text{CH}_3\text{CH}_2\text{COO}^-](\text{octan-1-ol})}{[\text{CH}_3\text{CH}_2\text{COO}^-](\text{aq})} \right) = -3,05$$

$$P_{\text{CH}_3\text{CH}_2\text{COO}^-} = 10^{-3,05} = 0,000891$$

$$\log P_{\text{nonionisk forbindelse}} = \log \left(\frac{[\text{CH}_3\text{CH}_2\text{COOH}](\text{octan-1-ol})}{[\text{CH}_3\text{CH}_2\text{COOH}](\text{aq})} \right) = 0,48$$

$$P_{\text{CH}_3\text{CH}_2\text{COOH}} = 10^{0,48} = 3,02$$

Hvordan bestemmes H-donor henholdsvis H-acceptorer i en forbindelse?

Man kan få Marvin Sketch til at vise grupper, som er henholdsvis hydrogen-donor og hydrogen-acceptor til hydrogenbindinger.

Donorgrupper vises med blått og angives ved D, og acceptorgrupper vises med rødt og angives ved A.

I hovedmenuen vælges **Calculations**

I menu vælges punktet **Other**

I undermenuen vælges **H Donor/Acceptor**. Der efter trykkes på OK. Herved vises atomerne/atomrupperne med de omtalte farver og symboler, se eksemplet til højre.

H Bond Donor/Acceptor

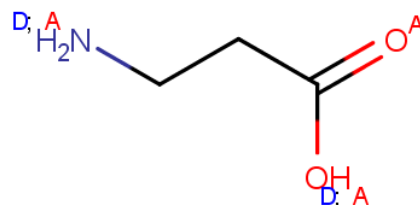
File Edit

Donor count = 2

Donor sites = 3

Acceptor count = 3

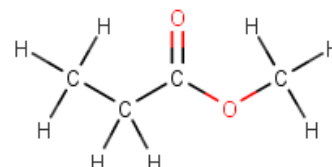
Acceptor sites = 5



Hvordan laves et ^1H -NMR spektre af en forbindelse?

MarvinSketch kan lave "beregnete/simulerede" ^1H -NMR spektre, dvs. ud fra en kemisk struktur kan man få opstillet et ^1H -NMR med kemiske skifte, koblingsmønster, integraler mm. Der er således ikke tale om "eksperimentelt målte" spektre, men beregnede, og der kan selvfølgelig være forskel på eventuelle eksperimentelle spektre og de ved MarvinSketch bestemte. Det er vigtigt at have forståelse for forskellige indstillinger i MarvinSketch, som man kan lave, for at få en god overensstemmelse mellem et eventuelt givet ^1H -NMR spektre og det man selv er kommet frem til. Her gives de vigtigste muligheder.

Første skridt er at lave en tegning af den kemiske struktur. Her kan det, udelukkende for at få overblik over H-atomernes placering, være en fordel at lave en strukturformel, som viser alle C- og H-atomer i molekylet (se overfor for hvordan dette gøres).



Herefter fås ^1H -NMR spektret ved:

I hovedmenuen vælges **Calculations**

I menu vælges punktet **NMR**

I undermenuen vælges **HNMR**. Når der trykkes på HNMR, åbnes et nyt vindue med et HNMR spektrum af det tegnede molekyle.

Valg af mulige indstillinger vha. under menuer eller "knapper"

Vindue kemiske forbindelse

Vindue bruges til at zoom ind/ud

Vindue med ^1H -NMR spektret af den kemiske forbindelse vist i "vinduet" til venstre

Vindue med detaljer om det viste spektrum. Klikkes på en bestemt gruppe af H-atomer, så viser deres "bidrag" til spektret i vinduet til højre. Nedenfor: Indstillinger for vinduet

Atom nu...	Chemica...	Net inte...	Multiplet...	Quality
1, 1, 1	1,14 ppm	3	t	good
2, 2	2,39 ppm	2	q	medium
5, 5, 5	3,64 ppm	3	s	good

Multiplet information Atom information Coupling information

Nucleus: ^1H Unit: ppm Frequency: 200.0 MHz

X = 2,66 ppm; Y = 9,06

Viser valg af vigtige paramter for det viste ^1H -NMR spektrum. Læg især mærke til den valgte "Frequency". Det viste spektrum afhænger en del af valget af "NMR Prediction Frequency", se under menuen "Options".

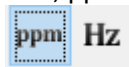
Ved hjælp af den øverste menu kan vælges forskellige indstillinger. Især er "NMR Prediction Frequency" en vigtig indstilling for visning af det konkrete spektrum (se under Options). Nogle af de vigtigste indstillinger kan også foretages ved bruge af "knapperne" under menulinjen. Her omtales nogle vigtige.

Hvordan vises/fjernes "integralerne" på spektret?

Integralerne er vist med rødt på spektret. Man kan få vist/fjernet integralerne i menupunktet View/Integral Curve eller benytte knappen:

**Hvordan skiftes mellem "ppm" og "Hz" på x-aksen?**

Man kan ændre enheden for det kemiske skifte på x-aksen ved i menupunktet View/Measurement unit; ppm eller Hz. Eller ved at benytte knapperne:



Normalt benyttes **ppm**.

Hvordan skiftes mellem at vise af spin-spin koblingsmønstret henholdsvis ikke at vise dette?

Man kan ændre visning af spin-spin kobling i menupunktet Options/Spin-Spin coupling. Eller ved at benytte knappen:



Normalt er spin-spin koblingen aktiveret.

Hvordan ændres "NMR prediction frequency"?

Man kan ændre frekvensen for "apparatet" ved at vælge menupunktet Options/NMR prediction frequency. Herved fremkommer en liste af muligheder gående fra 60 MHz til 1000 MHz. Ovenstående spektrum er vist ved 200 MHz.