Instalación de Software de la empresa ChemAxon.

Paso 1. Vaya a la página de ChemAxon y descargar la aplicación 'Marvin'. Se le solicitará que se registre para ingresar.

https://download.chemaxon.com/marvin

Chemaxon	
Iniciar sesión	
Email	
Ingrese un nombre de usuario	
Contraseña	
Ingrese una contraseña	
Recordarme	
Iniciar sesión	
¿Necesita ayuda con el inicio de sesión?	

Paso 2. Seleccione su sistema operativo y descargue la aplicación.

U Chemaxon		Back to website
	Marvin 23.11 (1) (1) (2LI with deb) (2LI with rpm) (2LI with gradle) Windows Includes Marvin desktop applications, API, examples, documentation. Marvin .exe (64 bit) ()	

Paso 3. Instale la aplicación con las opciones por defecto.

Paso 4. En la misma página de descarga, abajo busque solicitud de licencia, 'Get My Key'

Get Your License	
Commercial Use Get in touch with us to access all the functionalities. Get In Touch	Non-Commercial Use For drawing structures, the free desktop version is available for personal use only. This license needs to be renewed every 2 months. Get My Key

Chemaxon			() -
	Your license key		
	lk_cf80b7e276bb4699bfb2ce4d1f4e472	COPY KEY	

Paso 6. Abra la aplicación MarvinSketch recién instalada en su computador. Aparecerá el siguiente mensaje de alerta.



Presione 'Install Licenses'

Paso 7. Ingrese la licencia en el ChemAxon License Manager, en la opción 'License server configuration'

Chemaxon License Manager			×
Install license file I conse configuration	License se	rver configuration	
Create report Getate report Help	License key:	lk_cf80b7e276bb4699bfb2ce4	d1f4e472
	License server	URL: https://license.chemaxon.c	com
	For instructions,	see the documentation.	Test Apply
	:		

Paso. 8 Coloque 'Apply' y luego 'Test'. Si todo va bien saldrá el mensaje "Successful connection". Cierre esta ventana.

Paso 9. Abra nuevamente la aplicación MarvinSketch.



Ejemplo para estimar pKa de aspirina.

Paso 1: Abra MarvinSketch y seleccione 'Structure' > 'Name to Structure'. Ingrese 'aspirina' y se mostrará la estructura correspondiente de la aspirina.

Paso 2: Luego, vaya a 'Calculations' > 'Protonation' > 'pKa'. Esto mostrará el análisis de los valores de pKa para la estructura.



IMPORTANTE: Es importante tener en cuenta que los valores proporcionados son estimaciones destinadas a guiar el análisis de las estructuras. Si se emplean estructuras más complejas que involucren tautomerismo y resonancia, es posible que el programa genere valores incorrectos.