

COSMOS Produkte

COSMOS Viewer 3.0, COSMOS 5.0 and COSMOS 5.0 PRO

FEATUR MATRIX

COSMOS Viewer 3.0 COSMOS 5.0 COSMOS 5.0 PRO

Grafik

Stäbchenmodell	✓	✓	✓
schattierte Kugeln	✓	✓	✓
Kalotten-Modell	✓	✓	✓
Vektor-Grafik	✓	✓	✓
PovRay Export	✓	✓	✓
Frei definierbare Bitmapgröße	✓	✓	✓
gemischte Grafikstile	✓	✓	✓

Modellieren

2D-3D-Zeichen Funktion		✓	✓
“Drag and Drop” Molekülbaukasten		✓	✓
Symmetriefunktionen		✓	✓
Wasserstoffherzeugung		✓	✓
Peptid-Baukasten		✓	✓
Kraftfeldoptimierung		✓	✓
Moleküldynamik			✓

Editierung innerer Koordinaten	✓	✓
Docking-Funktionen	✓	✓

Berechnungen

BPT Ladungen		✓
NMR chem. Verschiebungen		✓
chemical Verschiebungstensoren		✓
NMR Spektren		✓
NMR Strukturfit		✓
Inertia Moments		✓
Abstands -“Constrains”		✓

Andere

Alle Raumgruppen für Symmetrieoperationen integriert		✓	✓
Importierung von PDB, Hyperchem, Sybyl, Gaussian, ShelX, IGLO, Insight, Turbomol, xyz, GROMOS, COSMOS Koordinatendateien	✓	✓	✓