



ExpertSoft GmbH

Dank hervorragenden Kundenlösungen ist ExpertSoft ein erfolgreiches Unternehmen. Es setzt das Wissen, die Dienstleistungen und die Produkte konsequent für den Erfolg der Kunden ein. ExpertSoft bietet für verschiedenste Bereiche hochprofessionelle Software- & Hardware-Lösungen an.

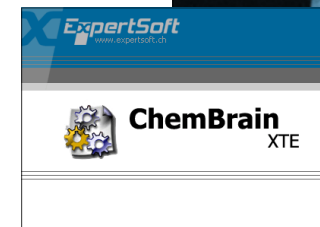
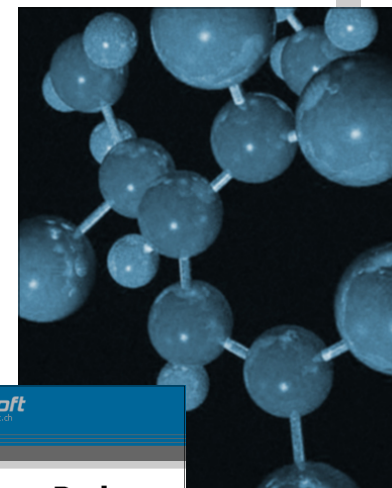
ExpertSoft dient ihren Kunden und begleitet diese zum Erfolg.



Solutions for Success

EXPERTSOFT GMBH

P. O. Box
Hofmatt
CH-6332 Hagendorn ZG
Telefon +41 417 809 766
Fax +41 417 809 765
E-Mail info@expertsoft.ch



ChemBrain XTE

*Vorhersage molekularer Eigenschaften
Prediction of molecular properties*

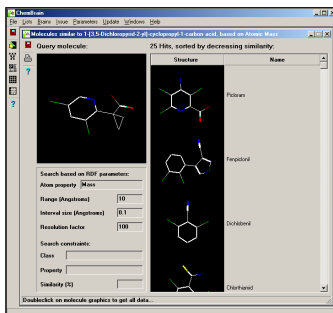


ChemBrain XTE

Die weltweit einzige chemische, lernfähige Datenbank für dreidimensionale Molekülstrukturen mit integrierter künstlicher Intelligenz zur Verwendung in der Vorhersage beliebiger molekularer Eigenschaften sowie zum Einsatz als Laborjournal.

Fähigkeiten

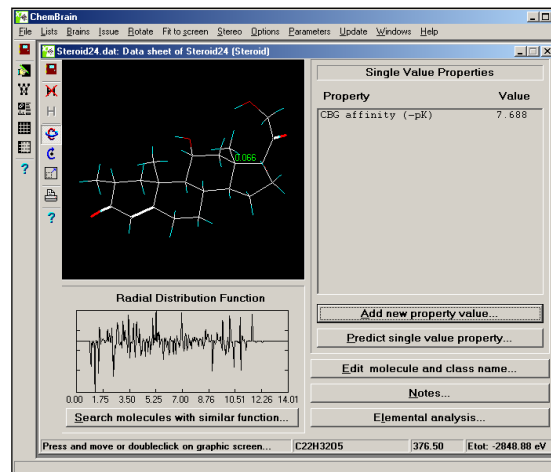
- Extrem einfache und benutzerfreundliche Eingabe von dreidimensionalen Molekülen, unterstützt von einem schnellen Geometrie-Optimierer



Datenbank: Ähnlichkeitssuche
Database: Similarity Search

- Kartierung von Molekülen auf Grund ihrer strukturellen Aehnlichkeit
- Erlaubt unzweideutige Fragmentsuche
- Ermöglicht Ähnlichkeitssuchen basierend auf verschiedenen molekularen Eigenschaften
- Texteingabe-Option ermöglicht seine Verwendung als Laborjournal
- Volle Kompatibilität mit allen Windows-Versionen ab Windows 95

Worldwide unique chemical database for three-dimensional molecular structures with integrated artificial intelligence capable of learning, applicable in the prediction of any molecular properties as well as for use as laboratory notebook.



Datenblätter mit 3D-Grafik
Data sheets with 3D graphics

Features

- Extremely simple and user-friendly input of three-dimensional molecules, supported by a fast geometry-optimizer
- Stores any kind of data for use in artificial neural networks calculations
- Learns from stored data for property prediction of as yet unknown molecules
- Automatic classification of molecules
- Mapping of molecules in relation to their structural similarity
- Allows unambiguous fragment search

- Enables similarity searches based on various molecular properties
- Text-input option enables its use as electronic lab journal
- Full compatibility with all Windows versions from Windows 95 and up



Struktur / Wirkungs-Korrelationen
Structure / Activity-Correlations



Eine Testversion finden Sie unter
Please find a trial version on

<http://science.expertsoft.ch>

EXPERTSOFT GMBH

P. O. Box
Hofmatt
CH-6332 Hagendorn ZG
Telefon +41 417 809 766
Fax +41 417 809 765
E-Mail info@expertsoft.ch