



## Rundschreiben des Rechenzentrums

Erzstraße 51  
D-38678 Clausthal-Zellerfeld  
Tel.: 05323/72-2045

---

Alle Fakultäten und wissenschaftliche Einrichtungen  
Zentrale Einrichtungen,  
Präsidialbüro  
Verwaltung  
Personalrat  
Gleichstellungsbüro

h i e r

13.04.2000

---

## PC SPARTAN PRO – Modellierung und Visualisierung von Molekülen

An das Rechenzentrum ist der Wunsch herangetragen worden, Verhandlungen über eine Campuslizenz für das Programm PC SPARTAN PRO aufzunehmen. PC SPARTAN PRO ist ein integriertes Molecular Modeling Programm für die PC-Plattform. Es besitzt folgende Funktionalitäten:

- Generieren und Editieren von 3d-Molekülmodellen, auch Import und Export zu anderen 2d- und 3d-Moleküleditoren
- umfangreiche Visualisierungsmöglichkeiten und Export (z.B. VRML, JPEG,...)
- quantenmechanische und molekülmechanische Berechnungsverfahren für Einzelmoleküle und Molekülsets (z.B. Konformationsanalysen)

Es wird in zwei Varianten angeboten: als Einzelplatzlizenz mit Dongle und als Floating License mit Netzwerk-Dongle. Die Netzwerkversion erfordert allerdings die Abnahme von mindestens 5 Lizenzen.

Einzelplatzlizenzen sind nach Kenntnis des Rechenzentrums bereits im Einsatz (Technische Chemie und Organische Chemie).

Kosten:

Einzelpreis: 1813,08 DM incl. MwSt

5 Lizenzen: 9065,40 DM incl. MwSt

10% Rabatt: 8158,86 DM incl. MwSt

Preis pro Lizenz: 1631,77 DM incl. MwSt

Der Lizenzpreis beinhaltet Lizenz, Datenträger und Handbuch.

Sinnvoll wäre die Installation von zunächst 5 Netzwerklizenzen, auf die campusweit zugegriffen werden kann. Laut Angaben des Vertreibers, SPIN-UP - LÜNTEC Technologiepark, ist dies möglich. Die Software könnte dann auch in CIP-Pools für Studierende bereitgestellt werden.

Interessenten werden gebeten, uns bis zum 8. Mai 2000 verbindlich mitzuteilen, mit welchem Betrag sie sich an der Beschaffung beteiligen würden.

Auskunft zum Programm erhalten Sie bei Herrn Dr. Drache, Technische Chemie, e-mail: [marco.drache@itc.tu-clausthal.de](mailto:marco.drache@itc.tu-clausthal.de)

Ansprechpartner für die Beschaffung: H. Weirich, e-mail: [weirich@rz.tu-clausthal.de](mailto:weirich@rz.tu-clausthal.de)

gez. Dr. H. Weirich