

## LigandScout 4.4 Functionality Comparison

Features	LigandScout Essential	LigandScout Advanced	LigandScout Expert
Structure-based Pharmacophore Modelling	۲	۲	۲
Ligand-based Pharmacophore Modelling	۲	۲	۲
Screening Library Generation		<u>(*)</u>	۲
Virtual Screening	<u>&gt;</u>		۲
Model Validation (automated ROC curve)	<u>©</u>	۲	۲
Extended Table Filtering & Export		۲	۲
High Speed 3D Conformer Generator		<u>(*)</u>	۲
Tautomer Generator			۲
Pharmacophore-based Alignment & Clustering			۲
2D Molecular Editor		<u>&gt;</u>	
Interactive Molecular Property Graphs		۲	۲
Protein Binding Pocket Finder		<u>&gt;</u>	
Interactive Molecular Docking			۲
Interactive Ligand Binding Affinity Estimation			•
Automated Apo-Site Pharmacophore Generator		۲	•
Molecular Dynamics Trajectories Import		۲	•
Interactive MD Trajectories Analysis Graphs			•
Inte:Ligand Knime Extensions			۲
Remote Cluster or Amazon Cloud Computing			۲
Pre-computed 3D Libraries for Screening			۲

inte:ligand

Mariahilferstrasse 74B/11 1070 Wien/Vienna Austria, Europe

www.inteligand.com office@inteligand.com Fax +43 1 8174955 1371