






# Herramientas incluidas en ChemBioOffice Ultra 2008

ChemBioOffice es sólo para sistemas operativos Windows. Los usuarios de Macintosh pueden adquirir ChemDraw/BioDraw, disponible en versiones para Mac y para Win.

<b>BioDraw</b>	
<b>New Annotations</b>	Almacenar anotaciones para cada elemento del dibujo. Las anotaciones incluyen desde texto introducido manualmente hasta documentos adjuntos, referencias bibliográficas o enlaces.
<b>BioArt</b>	Una paleta de ChemDraw personalizable que incluye símbolos bioquímicos comunes incluyendo membranas, estructuras celulares, etc.
<b>New Drawing elements</b>	Dibujar empleando elementos frecuentes como membranas, DNA, enzimas, receptores, flechas de reacciones, tRNA, ribosomas, proteínas en hélice, proteínas G, inmunoglobulinas, mitocondrias... y mucho más!
<b>Integration</b>	BioDraw trabaja a la perfección con los programas restantes de su escritorio para permitirle emplear sus rutas y diagramas biológicos en presentaciones y publicaciones.
<b>Pathway Diagrams</b>	BioDraw ofrece herramientas de dibujo diseñadas específicamente para diagramas de rutas; preciosas rutas biológicas en minutos!
<b>New Plasmid Map Tool</b>	Crear un mapa de un plásmido introduciendo el número de pares de bases en el mapa del plásmido y especificando las regiones, localizaciones y etiquetas de los marcadores.
<b>Rotation &amp; Integration</b>	Rotar los objetos de BioDraw y combinarlos con estructuras químicas.
<b>BioViz</b>	
<b>BioViz</b>	El complemento de bio-visualización permite crear representaciones gráficas de las bases de datos de ChemFinder para identificar tendencias y correlaciones en los subconjuntos de datos.
<b>New Compound Profiles</b>	Comparar visualmente y ordenar estructuras en base a los valores de propiedades seleccionadas y el perfil de coste asociado con cada propiedad.
<b>New Plotting</b>	Representar una o dos variables con diversas opciones. Situarse sobre el punto para ver la estructura química correspondiente. Filtrar los puntos representados por cualquier variable numérica mediante un control deslizable.
<b>New Plotting – statistical analysis and customization</b>	Realizar análisis estadísticos y mostrar los resultados en el gráfico, modificar la forma y color de los puntos, añadir cajas de comentarios, cambiar las etiquetas de los ejes y el color de fondo.
<b>New Plotting – subform plots</b>	Incluir gráficos en miniatura en celdas del subformulario para una rápida visualización de los datos del subformulario de compuesto en compuesto.
<b>Chem3D</b>	
<b>3D Glasses</b>	Las gafas incluidas ofrecen en el modo estereo una sensación más realista tridimensional (incluidas sólo para adquisiciones CD-ROM)
<b>Automatic Overlay</b>	Seleccionar varias moléculas y hacer que Chem3D las alinea automáticamente con una molécula dada.

<b>ChemDraw LiveLink</b>	Edición 2D y 3D simultánea! Dibujar estructuras en una ventana ChemDraw dentro de la aplicación Chem3D. Esta potente herramienta añade una visión 2D sincronizada siempre con la visión 3D.
<b>ChemProp</b>	Parámetros de propiedades incluyendo BP, MP y más.
<b>CLogP</b>	Propiedad CLogP, empleando la última tecnología para calcular el coeficiente de reparto n-octanol/agua.
<b>Dihedral Driver</b>	Nueva herramienta de análisis conformacional que permite generar diagramas de energía MM2.
<b>Enhanced Graphics</b>	Representación gráficos de alta calidad mediante openGL.
<b>New Formal Charges</b>	Al asignar cargas formales a átomos Chem3D generará automáticamente cargas deslocalizadas.
<b>GAMESS Interface</b>	Interfaz de Chem3D a GAMESS. (Nota: requiere la aplicación GAMES; consultar la sección de aplicaciones incluidas para confirmar.)
<b>Gaussian Interface</b>	Interfaz de Chem3D a Gaussian. (Nota: requiere la aplicación Gaussian consultar la sección de aplicaciones incluidas para confirmar.)
<b>Group Labels</b>	Muestra etiquetas de los grupos en la visualización del modelo Chem3D.
<b>Hydrogen Bonds</b>	Muestra automáticamente los enlaces de hidrógeno en visión 3D!
<b>New Kekule/Delocalized Display Mode</b>	Conmutar entre línea de puntos y alternancia de enlace doble y enlace sencillo para representar enlaces deslocalizados y aromáticos.
<b>MM2</b>	Soporte de MM2 incorporado para generar estructuras 3D realistas.
<b>New MMFF94</b>	MMFF94 es un campo de fuerzas en mecánica molecular tanto para moléculas orgánicas como para biopolímeros. El campo de fuerzas MMFF94 ofrece un conjunto de tipos de átomos más completo que MM2.
<b>Model Explorer/Chem3D</b>	Árbol de control jerárquico para explorar la estructura de modelos grandes. Importar un fichero PDB y examinar cadenas, grupos y ligandos. Esta nueva herramienta proporciona control más fino.
<b>Molecular Modeling &amp; Dynamics</b>	Modelado molecular con calidad de estación de trabajo.
<b>MOPAC Interface</b>	Interfaz de Chem3D a MOPAC. (Nota: requiere la aplicación MOPAC; consultar la sección de aplicaciones incluidas para confirmar.)
<b>Partial Surfaces</b>	Genera y muestra superficies parciales para sitios activos de proteínas.
<b>PowerPoint</b>	Inserta modelos Chem3D en archivos PowerPoint. Permite rotar y hacer zoom sobre los modelos Chem3D durante la presentación.
<b>Schrödinger Jaguar Interface</b>	Interfaz de Chem3D a Schrödinger Jaguar, paquete de cálculo ab-initio. (Nota: requiere la aplicación Jaguar; consultar la sección de aplicaciones incluidas para confirmar.)
<b>Spectrum Viewer</b>	Representación gráfica en ventana independiente de los cálculos espectrales que resultan de Jaguar, Gaussian y GAMESS.
<b>Stereo Hardware Support</b>	Compatibilidad de Chem3D con diversidad de monitores estereo, gafas 3D electrónicas y otros elementos hardware para ofrecer experiencia tridimensional real en el modelado.
<b>New Structure Browser</b>	Permite al usuario desplazarse arriba y abajo en una colección de moléculas de pequeño tamaño y comparar sus propiedades y estructuras.

<b>ChemDraw</b>	
<b>ActiveX Edit in ChemDraw</b>	Editar el documento con su versión instalada de ChemDraw, en lugar de ActiveX, para acceder a un estado de pantalla más real para la edición y a las funcionalidades completas de ChemDraw.
<b>New Annotations</b>	Almacenar anotaciones para incluir datos adicionales para cada estructura u objeto en su dibujo. Las anotaciones incluyen desde texto introducido manualmente hasta documentos adjuntos, referencias bibliográficas o enlaces.
<b>Atom Numbering</b>	Añade indicadores numéricos secuenciales a los átomos de una estructura.
<b>BioDraw</b>	Dibuja rutas biológicas.
<b>New Chem3D LiveLink</b>	Ver el aspecto 3D de las estructuras en una ventana flotante y abrir Chem3D con un solo clic desde ChemDraw.
<b>ChemDraw/Excel</b>	Utilizar Excel para organizar y analizar sus datos químicos.
<b>Chemical File Format</b>	Lectura y escritura de ficheros de formato químico incluyendo espectros y reacciones.
<b>Chemical Warnings</b>	Descripción de errores disponible colocando el ratón sobre el recuadro rojo.
<b>New CLogP</b>	CLogP/CMR ofrece las metodologías más modernas para calcular el coeficiente de reparto n-octanol/agua y la refractividad molar.
<b>Color Faded Shapes</b>	Las formas pueden ahora rellenarse con color desvaído.
<b>Custom Templates &amp; Nicknames</b>	Crear y editar plantillas y alias.
<b>New Database LiveLink</b>	Buscar estructuras químicas en las bases de datos de CambridgeSoft en tiempo real, mientras dibuja.
<b>Expand Generic Structure</b>	Genera múltiples estructuras a partir de una estructura genérica "abreviada".
<b>Floating Character Map</b>	Añade caracteres especiales de cualquier fuente al instante en cualquier documento ChemDraw.
<b>Floating Periodic Table</b>	Información de los elementos disponible en todo momento en la tabla periódica flotante en el escritorio.
<b>New Freehand Drawing Tool</b>	Herramienta intuitiva de dibujo que emplea el ratón u otro dispositivo de posición para dibujar formas "a pulso", libremente.
<b>Graphic Display &amp; Image</b>	Añade mayor detalle en los dibujos en pantalla y en los ficheros de imagen guardados.
<b>Graphical File Formats</b>	Importa gráficos de formatos GIF, TIFF, PNG, JPEG y BMP.
<b>New I/Draw Mode</b>	Nuevo modo de compatibilidad para ChemDraw.
<b>Improved ChemNMR</b>	Los espectros de RMN de protón NMR presentan mayor precisión en desplazamientos químicos y patrones de multiplicidad, y los espectros teóricos muestran con mayor claridad las predicciones de RNM tanto para protón como para carbono-13.
<b>New Improved Molecule Clean-up</b>	Una herramienta completamente revisada para mejorar la apariencia de las estructuras reajustándolas de forma consistente con un amplio espectro de tipos de estructuras.
<b>ISIS-style Data SGroups</b>	Permite adjuntar datos a los objetos.

<b>LabArt</b>	Dibujos de material de vidrio y de laboratorio con calidad de publicación EPS para incluir en los documentos ChemDraw.
<b>Mass &amp; Other Fragmentation Tools</b>	Tres herramientas de fragmentación: masa, disociación y retrosíntesis.
<b>MDL Molfile</b>	Lectura y escritura de ficheros en formato Molfile.
<b>MS Office Integration</b>	ChemDraw ofrece integración completa vía OLE para insertar los dibujos en cualquier documento de MS Office.
<b>Multi-Page Docs</b>	Crea documentos multipágina y posters en un único fichero ChemDraw.
<b>Name=Struct/Excel</b>	Genera una estructura ChemDraw en MS Excel al escribir el nombre químico sistemático para la mayoría de las sustancias.
<b>New Arrows Tool</b>	Controla todos los aspectos de las flechas dibujadas, incluyendo formación de arcos, longitud, estilo de cabeza, dipolo, no-reacción, etc.
<b>Object Specific Settings</b>	Crea dibujos con diversidad de estilos en diferentes partes del documento.
<b>Online Menu</b>	Dibuje una estructura o modelo y obtenga inmediatamente la información del proveedor en línea a través de ChemACX.Com.
<b>Polymer Draw</b>	Representa y maneja polímeros en ChemDraw.
<b>Properties LiveLink</b>	Estado dinámico de los nombres químicos, fórmulas, pesos moleculares y otras propiedades físicas añadidas al documento, que se actualizan automáticamente a medida que se introducen modificaciones en los diagramas de estructuras.
<b>Relative Stereochemistry</b>	Permite la especificación de relaciones entre grupos de estereocentros más pequeños que una molécula completa.
 <b>SD File Support</b>	Importar y exportar ficheros SD directamente en ChemDraw.
 <b>Sequence Tool</b>	Dibujar péptidos o secuencias de nucleótidos usando los códigos de 1 o 3 letras. Los átomos se etiquetan con los símbolos de los aminoácidos o nucleótidos. Las secuencias pueden expandirse o contraerse.
<b>Stereochemistry</b>	Identifica estereocentros usando reglas Cahn-Ingold Prelog.
<b>Stoichiometry Grid</b>	Sigue el rastro y actualiza automáticamente los datos estequiométricos para cualquier reacción química definida por el usuario.
<b>Struct&lt;=&gt;Name</b>	Produce nombres para muchos más tipos de compuestos, incluyendo moléculas con carga y sales, estructuras altamente simétricas, muchos tipos de compuestos inorgánicos y organometálicos, y muchos otros.
<b>Structure CleanUp</b>	Mejora la apariencia de los dibujos poco regulares
<b>Structure Drawing</b>	Dibuja estructuras químicas.
<b>Structure Perspective Tool</b>	Ajusta la perspectiva de las moléculas ChemDraw con simples movimientos del ratón en horizontal/vertical.
<b>Terminal Carbon Labeling</b>	Representación automática de las etiquetas atómicas en los átomos de carbono terminales.
<b>TLC Plate Tool</b>	Herramienta de reproducción de placas de cromatografía de capa fina para incluirlas en documentos ChemDraw que permite personalizar la representación de las manchas personalizadas, formas de luna, etc.
 <b>tPSA</b>	tPSA ofrece una aproximación rápida del área de superficie polar molecular, un parámetro útil para la predicción de propiedades de transporte de fármacos que muestra correlación con la absorción intestinal en humanos y la penetración de la barrera sangre-cerebro.

<b>ChemFinder</b>	
<b>3D Query/Finder</b>	Consultar la base de datos de ChemFinder por parámetros 3D.
<b>New ActiveX Control Boxes</b>	Incluir controles ActiveX en el formulario ChemFinder
<b>New Automatic Form Generation</b>	Construir o extender automáticamente las bases de datos importando estructuras de colecciones de ficheros de estructuras, bases de datos, ficheros .SD, u otras fuentes.
<b>BioViz</b>	El complemento de bio-visualización permite crear representaciones gráficas de las bases de datos de ChemFinder para identificar tendencias y correlaciones en los subconjuntos de datos.
<b>New CAL Programming</b>	CAL es un lenguaje de programación sencillo, accesible a no programadores, para tareas de automatización, demos autoejecutables y operaciones personalizadas que incluye herramientas de depuración.
<b>ChemFinder/Office</b>	Buscar en su ordenador o red estructuras químicas insertas en archivos Word, Excel, Powerpoint, ChemDraw, ISIS... hojear, buscar, refinar búsquedas y exportar la lista de resultados a cualquier destino.
<b>ChemFinder/Oracle</b>	Conexión directa a Oracle, y realización de todas las búsquedas y transacciones en el servidor.
<b>New Chemical Searching</b>	Buscar por (sub)estructura, similitud, valores numéricos, texto, fórmula química (incluyendo rangos de elementos, exclusión de elementos), fecha...
<b>New Hit List and Query Management</b>	Usar un árbol de navegación para seguir el historial de búsquedas entre sesiones, volver a ejecutar o reconstituir consultas; fusionar listas mediante acciones de arrastras y soltar en el árbol; consultas codificadas con colores en relación con los gráficos BioViz.
<b>New List Merge</b>	Fusionar listas de resultados con cualquier lógica: intersección, unión, substracción, substracción inversa.
<b>New Multiple data views</b>	Ver los resultados de uno en uno, en tabla o en vista multiformulario.
<b>New Property generation</b>	Generar muchos tipos de propiedades físicas; rellenar los campos de la base de datos automáticamente o generarlos al vuelo para cada registro.
<b>New Python Scripting</b>	Incluir scripts Python en botones de formulario o lanzar eventos; nuevo Script Editor mejorado, con ejecución interactiva línea a línea.
<b>New Subforms</b>	Enlazar datos relacionales a la tabla principal mediante subformularios.
<b>New Support Oracle</b>	Conexión directa y veloz a Oracle y las bases de datos de CambridgeSoft Cartridge.
<b>New Tabbed Forms</b>	División de un formulario en secciones mediante páginas de formulario con etiqueta.
<b>E-Notebook</b>	
<b>New Audit Trails</b>	Mantener una copia completa del experimento cada vez que se guarda, incluyendo el nombre de usuario y la fecha.
<b>AutoText</b>	Compartir protocolos escritos por anticipado donde se añaden de forma dinámica los datos del experimento.
<b>ChemDraw &amp; Stoichiometry Calculations</b>	E-Notebook realiza los largos y tediosos cálculos estequiométricos en función de la reacción dibujada y de los parámetros introducidos.

<b>Configurability</b>	Diseñar formularios y añadir botones adaptados a las necesidades del usuario (solo en configuración multiusuario)
<b>Document Pages</b>	Las páginas contienen hojas de cálculo Excel, documentos Word, dibujos ChemDraw, datos espectrales, imágenes y diapositivas PowerPoint.
<b>Extensive Data Types</b>	Las páginas incluyen esquemas de reacción ChemDraw, documentos de Microsoft Word y Excel y datos espectrales usando Galactic Spectral Control.
<b>Microsoft Office &amp; Galactic Spectra</b>	E-Notebook maneja todos los diversos tipos de datos que los químicos registran en sus cuadernos de laboratorio. Para los datos de formato libre pueden incluirse documentos de Microsoft Word o Excel. Para datos espectrales, la libreta electrónica incluye la herramienta Galactic Spectral Control para almacenar y analizar cientos de tipos de ficheros de espectros.
<b>Multiple Projects</b>	E-Notebook combina todas sus libretas de laboratorio en una sola, organizando libretas de proyectos en la manera que desea el usuario.
<b>Retrieval</b>	Búsqueda por estructura, palabra clave, fechas y otros tipos de datos.
<b>New SQL Server Express 2005</b>	E-Notebook trabaja con SQL Server Express 2005, adaptable a los cambios en las características de uso. El límite de tamaño permitido para la base de datos es dos veces el límite anterior con MSDE (SQL Server 2000).
<b>BioAssay</b>	
<b>New Built-in Reporting</b>	Crear informes de los datos almacenados en las tablas de datos mediante el Built-in Report Designer. Los informes pueden exportarse en diversos formatos para presentaciones y libretas de laboratorio. Permite manejar conjuntos de datos jerárquicos, formateado flexible, usar texto condicional y realizar cálculos sencillos.
<b>Calculations &amp; Graphing</b>	Cálculos automáticos cada vez que se introducen o importan nuevos datos. Múltiples opciones para facilitar el análisis, incluyendo diagramas de barras, columna apilada, puntos, líneas...
<b>Curve Fitting &amp; Validation</b>	Ajustar datos a cualquier ecuación de curva definida por el usuario. Eliminar valores atípicos ("outliers") y erróneos.
<b>Data Analysis &amp; Visualization</b>	Las tablas de datos están conectadas permitiendo visualizar los datos asociados en una pantalla de conjunto. Usando BioViz puede crear formularios personalizados para visualizar datos, y exportarlos a Microsoft Excel.
<b>New External Calculation</b>	Realizar cálculos externos sobre datos de BioAssay e importar los resultados. Los usuarios pueden accederse a sus propias máquinas de cálculo.
<b>Flexible Assay Management</b>	Hasta para los ensayos más básicos de proteínas, las variables independientes y dependientes que emplea el biólogo para cuantificar la eficacia pueden variar sustancialmente de ensayo a ensayo. Para afrontar esta variabilidad y adaptarse con rapidez a los diferentes ensayos y modelos biológicos se requiere un sistema flexible de gestión de datos. Con BioAssay, los investigadores o el personal de soporte en TIC simplemente definen las observables y los cálculos que constituyen el ensayo. La base de datos hace el resto. El usuario puede fijar ilimitados niveles de expansión jerárquica.
<b>New Plate Template Manager</b>	Añadir placas a la tabla de placas de un protocolo. Seleccionar entre los formatos existentes de placas o diseñar nuevos formatos. Las placas heredan el formato de pocillos y la información relativa a la concentración de la plantilla seleccionada. Incluye una representación gráfica de una placa M x N donde puede verse y modificarse los datos de los pocillos mediante funciones tipo Excel. Ver/editar datos múltiples simultáneamente para cada pocillo.
<b>New SQL Server Express 2005</b>	E-Notebook trabaja con SQL Server Express 2005, adaptable a los cambios en las características de uso. El límite de tamaño permitido para la base de datos es dos veces el límite anterior con MSDE (SQL Server 2000).

<b>Inventory</b>	
<b>Access ACX through Inventory</b>	Buscar en la base de datos ChemACX para añadir en su inventario. (No disponible en las versiones mediante descarga).
<b>New Access ChemACX Online</b>	Usar la interfaz de Inventory para buscar compuestos, proveedores y propias Hojas de Datos de Seguridad de Materiales (MSDS) en ChemACX.com.
<b>Audit Trails</b>	Los cambios en las localizaciones, contenedores y compuestos se registran en la base de datos.
<b>Barcode Generation</b>	Asignar códigos de barras únicos para cada contenedor del sistema. Imprimir simplemente el código de barras y adherirlo al contenedor.
<b>Cascading Location Model</b>	Un modelo completo en cascada de las localizaciones. Los laboratorios deciden por ellos mismos el nivel de detalle de sus localizaciones. Un laboratorio puede definir sus localizaciones como pocillos en placas que residen en estanterías dentro de neveras en diferentes salas. Otro laboratorio puede decidir rastrear los reactivos a nivel de mesas de trabajo o armarios. En cualquier caso, permite seguir los productos de laboratorio a laboratorio.
<b>Container Manager</b>	Se crean contenedores para representar los contenedores reales de su laboratorio. A cada contenedor se le asigna un código de barras único, que puede imprimirse con formato personalizado desde la interfaz de Inventory. Los usuarios pueden introducir, retirar, mover y duplicar contenedores a voluntad.
<b>Customized Report Generation/Creation</b>	Generador de informes integrado. Un asistente le permite crear nuevas plantillas de informes con rapidez y adaptados a sus necesidades específicas. Crear informes (con datos clasificados) para resultados de búsquedas o contenidos de las localizaciones. Los informes pueden exportarse en varios formatos incluyendo PDF, HTML, Excel, RTF y JPEG. Enviar por e-mail los informes al instante!
<b>Duplicate Checking / Inventory</b>	Los duplicados se detentan de acuerdo a los campos clave que el usuario define (e.g. estructura, número CAS, nombre de la sustancia).
<b>New Import Data from Excel</b>	Utilidad para asistir al importar datos almacenados en hojas Excel a la base de datos de Inventory.
<b>Material Safety Data &amp; ChemACX</b>	Añadir y buscar sus propias Hojas de Datos de Seguridad de Materiales (MSDS), así como buscar entre más de 20.000 MSDS en ChemACX.
<b>New Reconcile Location Contents</b>	Reconciliar los contenidos de las localizaciones para asegurarse de que los registros en la base de datos se corresponden con los contenidos de la localización.
<b>Searching</b>	Pueden realizarse búsquedas por cualquiera de los campos del registro, incluyendo estructura química, fórmula molecular y peso molecular. La aplicación incluye un número de formularios de búsqueda en el inventario específicamente diseñados.
<b>New SQL Server Express 2005</b>	E-Notebook trabaja con SQL Server Express 2005, adaptable a los cambios en las características de uso. El límite de tamaño permitido para la base de datos es dos veces el límite anterior con MSDE (SQL Server 2000).
<b>SQL Server Role Based Security</b>	Los nombres y claves de acceso de los usuarios están vinculados a funciones predefinidas en SQL Server. Estas funciones controlan qué botones y enlaces están disponibles al entrar en el sistema.

