











# Herramientas incluidas en ChemOffice 2008




ChemOffice 2008 está disponible en tres versiones: Ultra (**U**), Pro (**P**) y Std (**S**)

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

CO'08	<b>BioDraw</b>	
U,P	 <b>Annotations</b>	Almacenar anotaciones para cada elemento del dibujo. Las anotaciones incluyen desde texto introducido manualmente hasta documentos adjuntos, referencias bibliográficas o enlaces.
U,P	<b>BioArt</b>	Una paleta de ChemDraw personalizable que incluye símbolos bioquímicos comunes incluyendo membranas, estructuras celulares...
U,P	 <b>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!
U,P	<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.
U,P	<b>Pathway Diagrams</b>	BioDraw ofrece herramientas de dibujo diseñadas específicamente para diagramas de rutas; preciosas rutas biológicas en minutos!
U,P	 <b>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.
U,P	<b>Rotation &amp; Integration</b>	Rotar los objetos de BioDraw y combinarlos con estructuras químicas.
CO'08	<b>BioViz</b>	
U	<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.
U	 <b>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.
U	 <b>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.
U	 <b>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.
U	 <b>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.
CO'08	<b>Chem3D</b>	
U,P	<b>3D Glasses</b>	Las gafas incluidas ofrecen en el modo estereo una sensación más realista tridimensional (incluidas sólo para adquisiciones CD-ROM)

U,P	<b>Automatic Overlay</b>	Seleccionar varias moléculas y hacer que Chem3D las alinea automáticamente con una molécula dada.
U,P	<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.
U,P,S	<b>ChemProp</b>	Parámetros de propiedades incluyendo BP, MP y más.
U,P	<b>CLogP</b>	Propiedad CLogP, empleando la última tecnología para calcular el coeficiente de reparto n-octanol/agua.
U,P,S	<b>Dihedral Driver</b>	Nueva herramienta de análisis conformacional que permite generar diagramas de energía MM2.
U,P,S	<b>Enhanced Graphics</b>	Representación gráficos de alta calidad mediante OpenGL.
U,P	 <b>Formal Charges</b>	Al asignar cargas formales a átomos Chem3D generará automáticamente cargas deslocalizadas.
U,P	<b>GAMESS Interface</b>	Interfaz de Chem3D a GAMESS. (Nota: requiere la aplicación GAMES; consultar la sección de aplicaciones incluidas para confirmar.)
U,P	<b>Gaussian Interface</b>	Interfaz de Chem3D a Gaussian. (Nota: requiere la aplicación Gaussian consultar la sección de aplicaciones incluidas para confirmar.)
U,P,S	<b>Group Labels</b>	Muestra etiquetas de los grupos en la visualización del modelo Chem3D.
U,P,S	<b>Hydrogen Bonds</b>	Muestra automáticamente los enlaces de hidrógeno en visión 3D!
U,P,S	 <b>Kekule/Delocalized Display Mode</b>	Conmutar entre línea de puntos y alternancia de enlace doble y enlace sencillo para representar enlaces deslocalizados y aromáticos.
U,P,S	<b>MM2</b>	Soporte de MM2 incorporado para generar estructuras 3D realistas.
U,P	 <b>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.
U,P,S	<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.
U,P,S	<b>Molecular Modeling &amp; Dynamics</b>	Modelado molecular con calidad de estación de trabajo.
U,P	<b>MOPAC Interface</b>	Interfaz de Chem3D a MOPAC. (Nota: requiere la aplicación MOPAC; consultar la sección de aplicaciones incluidas para confirmar).
U,P	<b>Partial Surfaces</b>	Genera y muestra superficies parciales para sitios activos de proteínas.
U,P,S	<b>PowerPoint</b>	Inserta modelos Chem3D en archivos PowerPoint. Permite rotar y hacer zoom sobre los modelos Chem3D durante la presentación.
U,P	<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.)
U,P,S	<b>Spectrum Viewer</b>	Representación gráfica en ventana independiente de los cálculos espectrales que resultan de Jaguar, Gaussian y GAMESS.
U,P,S	<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.
U,P	 <b>Structure Browser</b>	Permite al usuario desplazarse arriba y abajo en una colección de moléculas de pequeño tamaño y comparar sus propiedades y estructuras.

CO'08	ChemDraw	
U,P,S	<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.
U,P,S	<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.
U,P,S	<b>Atom Numbering</b>	Añade indicadores numéricos secuenciales a los átomos de una estructura.
U,P	<b>BioDraw</b>	Dibuja rutas biológicas.
U,P	<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.
U,P	<b>ChemDraw/Excel</b>	Utilizar Excel para organizar y analizar sus datos químicos.
U,P,S	<b>Chemical File Format</b>	Lectura y escritura de ficheros de formato químico incluyendo espectros y reacciones.
U,P,S	<b>Chemical Warnings</b>	Descripción de errores disponible colocando el ratón sobre el recuadro rojo.
U,P	<b>New CLogP</b>	CLogP/CMR ofrece las metodologías más modernas para calcular el coeficiente de reparto n-octanol/agua y la refractividad molar.
U,P,S	<b>Color Faded Shapes</b>	Las formas pueden ahora rellenarse con color desvaído.
U,P,S	<b>Custom Templates &amp; Nicknames</b>	Crear y editar plantillas y alias.
U,P	<b>New Database LiveLink</b>	Buscar estructuras químicas en las bases de datos de CambridgeSoft en tiempo real, mientras dibuja.
U,P,S	<b>Expand Generic Structure</b>	Genera múltiples estructuras a partir de una estructura genérica "abreviada".
U,P,S	<b>Floating Character Map</b>	Añade caracteres especiales de cualquier fuente al instante en cualquier documento ChemDraw.
U,P,S	<b>Floating Periodic Table</b>	Información de los elementos disponible en todo momento en la tabla periódica flotante en el escritorio.
U,P,S	<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.
U,P,S	<b>Graphic Display &amp; Image</b>	Añade mayor detalle en los dibujos en pantalla y en los ficheros de imagen guardados.
U,P,S	<b>Graphical File Formats</b>	Importa gráficos de formatos GIF, TIFF, PNG, JPEG y BMP.
U,P,S	<b>New I/Draw Mode</b>	Nuevo modo de compatibilidad para ChemDraw.
U,P	<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.
U,P,S	<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.
U,P,S	<b>ISIS-style Data SGroups</b>	Permite adjuntar datos a los objetos.

U,P,S	<b>LabArt</b>	Dibujos de material de vidrio y de laboratorio con calidad de publicación EPS para incluir en los documentos ChemDraw.
U,P,S	<b>Mass &amp; Other Fragmentation Tools</b>	Tres herramientas de fragmentación: masa, disociación y retrosíntesis.
U,P,S	<b>MDL Molfile</b>	Lectura y escritura de ficheros en formato Molfile.
U,P,S	<b>MS Office Integration</b>	ChemDraw ofrece integración completa vía OLE para insertar los dibujos en cualquier documento de MS Office.
U,P,S	<b>Multi-Page Docs</b>	Crea documentos multipágina y posters en un único fichero ChemDraw.
U,P	<b>Name=Struct/Excel</b>	Genera una estructura ChemDraw en MS Excel al escribir el nombre químico sistemático para la mayoría de las sustancias.
U,P,S	<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.
U,P,S	<b>Object Specific Settings</b>	Crea dibujos con diversidad de estilos en diferentes partes del documento.
U,P,S	<b>Online Menu</b>	Dibuje una estructura o modelo y obtenga inmediatamente la información del proveedor en línea a través de ChemACX.Com.
U,P,S	<b>Polymer Draw</b>	Representa y maneja polímeros en ChemDraw.
U,P,S	<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.
U,P,S	<b>Relative Stereochemistry</b>	Permite la especificación de relaciones entre grupos de estereocentros más pequeños que una molécula completa.
U,P,S	 <b>SD File Support</b>	Importar y exportar ficheros SD directamente en ChemDraw.
U,P	 <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.
U,P,S	<b>Stereochemistry</b>	Identifica estereocentros usando reglas Cahn-Ingold Prelog.
U,P,S	<b>Stoichiometry Grid</b>	Sigue el rastro y actualiza automáticamente los datos estequiométricos para cualquier reacción química definida por el usuario.
U,P	<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.
U,P,S	<b>Structure CleanUp</b>	Mejora la apariencia de los dibujos poco regulares
U,P,S	<b>Structure Drawing</b>	Dibuja estructuras químicas.
U,P,S	<b>Structure Perspective Tool</b>	Ajusta la perspectiva de las moléculas ChemDraw con simples movimientos del ratón en horizontal/vertical.
U,P,S	<b>Terminal Carbon Labeling</b>	Representación automática de las etiquetas atómicas en los átomos de carbono terminales.
U,P,S	<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.
U,P,S	 <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.

CO'08	ChemFinder	
U	3D Query/Finder	Consultar la base de datos de ChemFinder por parámetros 3D.
U,P,S	<b>New</b> ActiveX Control Boxes	Incluir controles ActiveX en el formulario ChemFinder
U,P,S	<b>New</b> Automatic Form Generation	Construir o extender automáticamente las bases de datos importando estructuras de colecciones de ficheros de estructuras, bases de datos, ficheros .SD, u otras fuentes.
U	BioViz	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.
U,P,S	<b>New</b> CAL Programming	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.
U,P,S	ChemFinder/Office	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.
U	ChemFinder/Oracle	Conexión directa a Oracle, y realización de todas las búsquedas y transacciones en el servidor.
U,P,S	<b>New</b> Chemical Searching	Buscar por (sub)estructura, similitud, valores numéricos, texto, fórmula química (incluyendo rangos de elementos, exclusión de elementos), fecha...
U,P,S	<b>New</b> Hit List and Query Management	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.
U,P,S	<b>New</b> List Merge	Fusionar listas de resultados con cualquier lógica: intersección, unión, substracción, substracción inversa.
U,P,S	<b>New</b> Multiple data views	Ver los resultados de uno en uno, en tabla o en vista multiformulario.
U	<b>New</b> Property generation	Generar muchos tipos de propiedades físicas; rellenar los campos de la base de datos automáticamente o generarlos al vuelo para cada registro.
U,P	<b>New</b> Python Scripting	Incluir scripts Python en botones de formulario o lanzar eventos; nuevo Script Editor mejorado, con ejecución interactiva línea a línea.
U,P,S	<b>New</b> Subforms	Enlazar datos relacionales a la tabla principal mediante subformularios.
U	<b>New</b> Support Oracle	Conexión directa y veloz a Oracle y las bases de datos de CambridgeSoft Cartridge.
U,P,S	<b>New</b> Tabbed Forms	División de un formulario en secciones mediante páginas de formulario con etiqueta.
CO'08	E-Notebook	
U,P,S	<b>New</b> Audit Trails	Mantener una copia completa del experimento cada vez que se guarda, incluyendo el nombre de usuario y la fecha.
U,P,S	AutoText	Compartir protocolos escritos por anticipado donde se añaden de forma dinámica los datos del experimento.
U,P,S	ChemDraw & Stoichiometry Calculations	E-Notebook realiza los largos y tediosos cálculos estequiométricos en función de la reacción dibujada y de los parámetros introducidos.

<b>U,P,S</b>	<b>Configurability</b>	Diseñar formularios y añadir botones adaptados a las necesidades del usuario (solo en configuración multiusuario)
<b>U,P,S</b>	<b>Document Pages</b>	Las páginas contienen hojas de cálculo Excel, documentos Word, dibujos ChemDraw, datos espectrales, imágenes y diapositivas PowerPoint.
<b>U,P,S</b>	<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>U,P,S</b>	<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>U,P,S</b>	<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>U,P,S</b>	<b>Retrieval</b>	Búsqueda por estructura, palabra clave, fechas y otros tipos de datos.
<b>U,P</b>	<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).

