





Herramientas incluidas en ChemBioDraw Ultra 11.0

(W): herramienta disponible solo para plataforma Windows

BioDraw	
New Annotations	Almacenar anotaciones para cada elemento del dibujo: texto introducido manualmente, documentos adjuntos, referencias bibliográficas, enlaces...
BioArt	Una paleta de ChemDraw personalizable que incluye símbolos bioquímicos comunes incluyendo membranas, estructuras celulares, etc.
New Drawing elements	Dibujar empleando elementos frecuentes como membranas, DNA, enzimas, receptores, flechas de reacciones, tRNA, ribosomas, proteínas en hélice, proteínas G, inmunoglobulinas, mitocondrias... y mucho más!
Integration	BioDraw trabaja a la perfección con los programas restantes de su escritorio para permitirle emplear sus diagramas en presentaciones y publicaciones.
Pathway Diagrams	BioDraw ofrece herramientas de dibujo diseñadas específicamente para diagramas de rutas; preciosas rutas biológicas en minutos!
New Plasmid Map Tool	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.
Rotation & Integration	Rotar los objetos de BioDraw y combinarlos con estructuras químicas.
Chem3D	
ChemProp	(W) Parámetros de propiedades incluyendo BP, MP y más.
Dihedral Driver	(W) Nueva herramienta de análisis conformacional que permite generar diagramas de energía MM2.
Enhanced Graphics	(W) Representación gráficos de alta calidad mediante OpenGL.
Group Labels	(W) Muestra etiquetas de los grupos en la visualización del modelo Chem3D.
Hydrogen Bonds	(W) Muestra automáticamente los enlaces de hidrógeno en visión 3D!
New Kekule/Delocalized Display Mode	(W) Conmutar entre línea de puntos y alternancia de enlace doble y enlace sencillo para representar enlaces deslocalizados y aromáticos.
MM2	(W) Soporte de MM2 incorporado para generar estructuras 3D realistas.
Model Explorer/Chem3D	(W) 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.
Molecular Modeling & Dynamics	(W) Modelado molecular con calidad de estación de trabajo.
PowerPoint	(W) Inserta modelos Chem3D en archivos PowerPoint. Permite rotar y hacer zoom sobre los modelos Chem3D durante la presentación.
Spectrum Viewer	(W) Representación gráfica en ventana independiente de los cálculos espectrales que resultan de Jaguar, Gaussian y GAMESS.
Stereo Hardware Support	(W) Compatibilidad de Chem3D con diversidad de monitores e stereo, gafas 3D electrónicas y otros elementos hardware para ofrecer experiencia tridimensional real en el modelado.

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

Mass & Other Fragmentation Tools	Tres herramientas de fragmentación: masa, disociación y retrosíntesis.
MDL Molfile	Lectura y escritura de ficheros en formato Molfile.
MS Office Integration	(W) ChemDraw ofrece integración completa vía OLE para insertar los dibujos en cualquier documento de MS Office.
Multi-Page Docs	Crea documentos multipágina y posters en un único fichero ChemDraw.
Name=Struct/Excel	(W) Genera una estructura ChemDraw en MS Excel al escribir el nombre químico sistemático para la mayoría de las sustancias.
New Arrows Tool	Controla todos los aspectos de las flechas dibujadas, incluyendo formación de arcos, longitud, estilo de cabeza, dipolo, no-reacción, etc.
Object Specific Settings	Crea dibujos con diversidad de estilos en diferentes partes del documento.
Online Menu	(W) Dibuje una estructura o modelo y obtenga inmediatamente la información del proveedor en línea a través de ChemACX.Com.
Polymer Draw	Representa y maneja polímeros en ChemDraw.
Properties LiveLink	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.
Relative Stereochemistry	Permite la especificación de relaciones entre grupos de estereocentros más pequeños que una molécula completa.
 SD File Support	Importar y exportar ficheros SD directamente en ChemDraw.
 Sequence Tool	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.
Stereochemistry	Identifica estereocentros usando reglas Cahn-Ingold Prelog.
Stoichiometry Grid	Sigue el rastro y actualiza automáticamente los datos estequiométricos para cualquier reacción química definida por el usuario.
Struct<=>Name	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.
Structure CleanUp	Mejora la apariencia de los dibujos poco regulares
Structure Drawing	Dibuja estructuras químicas.
Structure Perspective Tool	Ajusta la perspectiva de las moléculas ChemDraw con simples movimientos del ratón en horizontal/vertical.
Terminal Carbon Labeling	Representación automática de las etiquetas atómicas en los átomos de carbono terminales.
TLC Plate Tool	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.
 tPSA	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.
ChemFinder	
 ActiveX Control Boxes	(W) Incluir controles ActiveX en el formulario ChemFinder

New Automatic Form Generation	(W) Construir o extender automáticamente las bases de datos importando estructuras de colecciones de ficheros de estructuras, bases de datos, ficheros .SD, u otras fuentes.
New CAL Programming	(W) 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.
ChemFinder/Office	(W) 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.
New Chemical Searching	(W) Buscar por (sub)estructura, similitud, valores numéricos, texto, fórmula química (incluyendo rangos de elementos, exclusión de elementos), fecha...
New Hit List and Query Management	(W) 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.
New List Merge	(W) Fusionar listas de resultados con cualquier lógica: intersección, unión, substracción, substracción inversa.
New Multiple data views	(W) Ver los resultados de uno en uno, en tabla o en vista multiformulario.
New Subforms	(W) Enlazar datos relacionales a la tabla principal mediante subformularios.
New Tabbed Forms	(W) División de un formulario en secciones mediante páginas de formulario con etiqueta.
E-Notebook	
New Audit Trails	(W) Mantener una copia completa del experimento cada vez que se guarda, incluyendo el nombre de usuario y la fecha.
AutoText	(W) Compartir protocolos escritos por anticipado donde se añaden de forma dinámica los datos del experimento.
ChemDraw & Stoichiometry Calculations	(W) E-Notebook realiza los largos y tediosos cálculos estequiométricos en función de la reacción dibujada y de los parámetros introducidos.
Configurability	(W) Diseñar formularios y añadir botones adaptados a las necesidades del usuario (solo en configuración multiusuario)
Document Pages	Las páginas contienen hojas de cálculo Excel, documentos Word, dibujos ChemDraw, datos espectrales, imágenes y diapositivas PowerPoint.
Extensive Data Types	(W) Las páginas incluyen esquemas de reacción ChemDraw, documentos de Microsoft Word y Excel y datos espectrales usando Galactic Spectral Control.
Microsoft Office & Galactic Spectra	(W) 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.
Multiple Projects	E-Notebook combina todas sus libretas de laboratorio en una sola, organizando libretas de proyectos en la manera que desea el usuario.
Retrieval	Búsqueda por estructura, palabra clave, fechas y otros tipos de datos.

