

ChemOffice Professional

ChemOffice Professional 是一款智慧型科學繪圖軟體並可提升研究生產力，軟體整合一系列應用程式，可作為科學家與研究人員記錄、儲存、回覆或分享化合物、反應、材料和性質數據的效率工具。ChemOffice Professional 可以幫助科學家和生物學家更有效地追蹤研究工作，軟體能夠將化學結構與生物活性聯結，並且讓數據視覺化，讓科學家更深入了解研究成果。

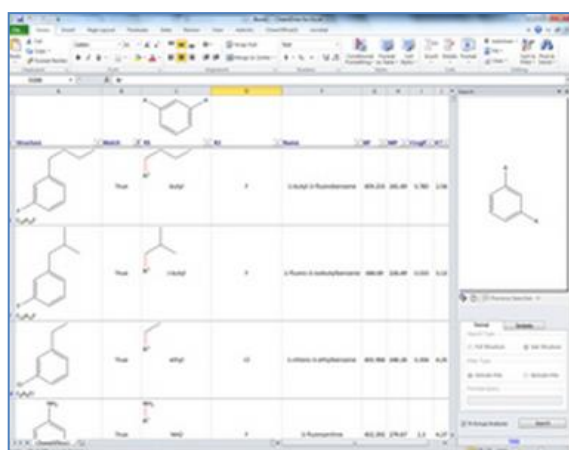


圖 1.利用 ChemDraw for Excel 可以產生結構活性圖表，進一步查詢芳香環 R-group

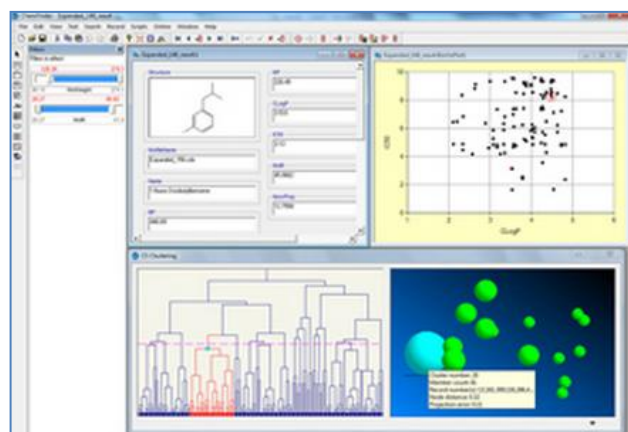


圖 2.利用 ChemFinder 可將自 SDfile 匯入的化合物資料以結構型態進行分析，呈現視覺化圖表(散點圖、濾鏡、叢集圖等)。

ChemOffice Professional 包含的應用程式如下：

- **ChemDraw Professional** 提供全球數以萬計科學家快速並有效率的透過文件以及 ELNs 語法(electronic lab notebooks)進行繪製分子、反應和生物學反應機構與代謝途徑，查詢相關資料庫；現在包含了全球最多人使用的資料庫檢索平台-SciFinder。此外，尚能藉由結構產生精準化學名稱，以及預測性物質數據與光譜。
- **ChemDraw for Excel** 增加了將化學智能圖匯入 Excel 表格中的功能，讓化學家可透過 Excel 分析與排序，有組織地處理化合物一系列數據，並進一步探討結構與活性的關係。
- **Chem3D** 能夠展現結構的3D模組，讓化學家藉由觀察物質結構的3維空間以利評估結構的形狀、性質、活性和屬性。Chem3D也包含GAMESS和其他計算分析工具的介面，如Gaussian、MOPAC、Conflex 和Autodock。

- **ChemFinder** 是智慧型的個人資料庫系統，它能夠幫助科學家組織與統整個人感興趣的物質，還可以尋找相關性質，並將物質的性質資料轉成容易理解的圖表，令使用者能夠輕鬆辨別結構與活性間的關聯。
- **ChemFinder for Office** 將化學結構掃描成檔案製成目錄與文件檔案，方便使用者以繪製結構方式去查詢相關存檔文件。
- **ChemScript** 為一強大的 ChemOffice 後台腳本撰寫系統，可客製化進行化學結構操作與自動化流程的開發。
- **CDSL Mobile** 為 iPad 版本的 ChemDraw，適用於公司/組織等團體訂購模式。
- **ChemDraw Direct** 無需下載JavaScript的ChemDraw版本，直接登入網頁使用繪圖應用程式即可。

ChemOffice Professional 整合了專業的化學及生物學應用程式，使跨部門的研究團隊之間能夠輕鬆的共享檔案及文件，藉著溝通、合作，提升個人價值與提升團隊研究效能!!

ChemOffice Professional 提高研究人員個人生產力，以更科學精準的方式去組織及探索化合物、反應、材料和性質，再轉化為可操作運用的訊息，作出更有信心的決策。

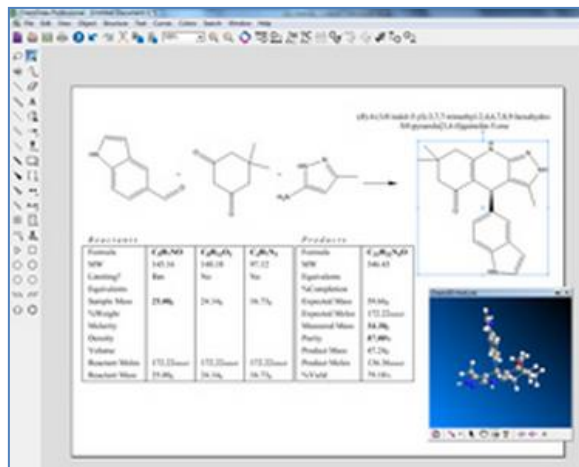


圖 3 為個人化工具可以組織與探索化合物、反應、材料與相關性質。

ChemDraw Professional

ChemDraw Professional是化學家與生物學家首選的畫板工具，它具有相當完整的功能，可供使用者選擇以不同出版刊物的文檔格式繪製化學結構，進行ELNs、數據庫和科學智能繪圖(結構式、分子式)的使用整合，以及查詢化學相關數據。現在，更將全球最多人使用的資料庫檢索平台-SciFinder，進行功能整合 !!

特點如下：

- 化學家與生物學家能夠依賴與直覺的繪圖方式— 精準處理及描繪有機物、有機金屬、高分子聚合物和生物高分子材料(包括胺基酸、胜肽、DNA 與 RNA 序列)，並可繪製立體化學構型。
- 使用ChemDraw Professional繪製化學物質與反應，便可直接串連至SciFinder檢索，不再需要花費時間將結構或反應複製/貼上。
- 利用豐富的生物模板和圖形建立化學結構、細胞及反應/代謝途徑圖，科學家能夠快速並準確的交流想法與研究成果。
- 使用ChemDraw Professional可預測化學物的性質、預測光譜數據、IUPAC命名和計算化學反應計量，節省大量時間並提高研究數據的準確性。
- 更快速找到目標化合物(結構)，同時搜尋類似之化學結構，縮短從檢索到結果產出的時間，提升研究效率。

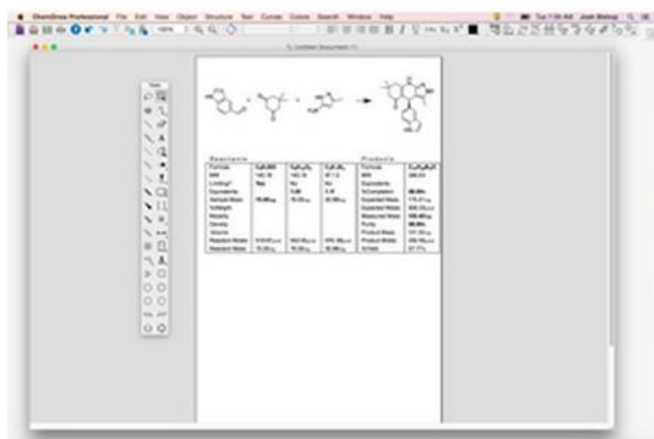


圖 1 ChemDraw Professional 15 相容於 MacOS 10.10。該圖為展現化學反應計量工具。

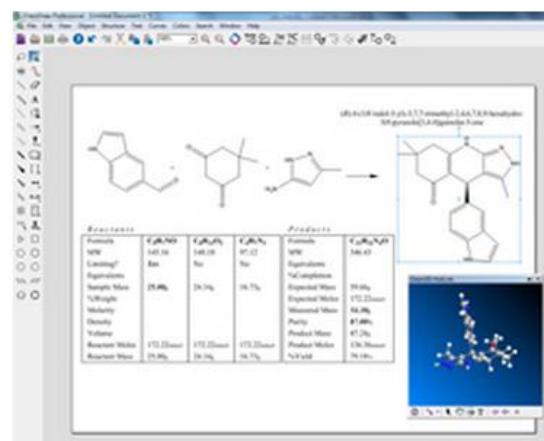


圖 2. 反應式可生成 IUPAC 命名並可展現 3D 模組，可進一步探討反應物性質。

ChemDraw 是全世界領先的科學繪圖應用程式。數以萬計的全球使用者倚賴此操作直覺容易，並具高品質輸出與強大的化學智能繪圖技術，與內建豐富的生物學資料工具。所有的優點皆整合於 ChemOffice Professional 系列與其他相關應用產品。

ChemDraw Professional 包含以下應用程式：

- **ChemDraw Professional** 提供全球數以萬計科學家快速並有效率的透過文件以及 ELNs 語法(electronic lab notebooks)進行繪製分子、反應和生物學反應機構與代謝途徑，查詢相關資料庫；現在包含了全球最多人使用的資料庫檢索平台-SciFinder。此外，尚能藉由結構產生精準化學名稱，以及預測性物質數據與光譜。
- **ChemDraw for Excel** 增加了將化學智能圖匯入 Excel 表格中的功能，讓化學家可透過 Excel 分析與排序，有組織地處理化合物一系列數據，並進一步探討結構與活性的關係。
- **ChemFinder Std** 是一種化學智能個人化數據庫系統，可讓科學家用它來組織自己的化合物，並尋找與性質有關聯的結構。
- **ChemScript** 為一強大的 ChemOffice 後台腳本撰寫系統，可客製化進行化學結構操作與自動化流程的開發。

ChemDraw Professional 提供給化學家和生物學家一套容易使用的介面和豐富的出版刊物文檔格式，科學家需要的化學分子、反應表示和生物體與路徑的圖示，並且可產生相關化學性質數據、系統名稱(IUPAC 命名)以及光譜。

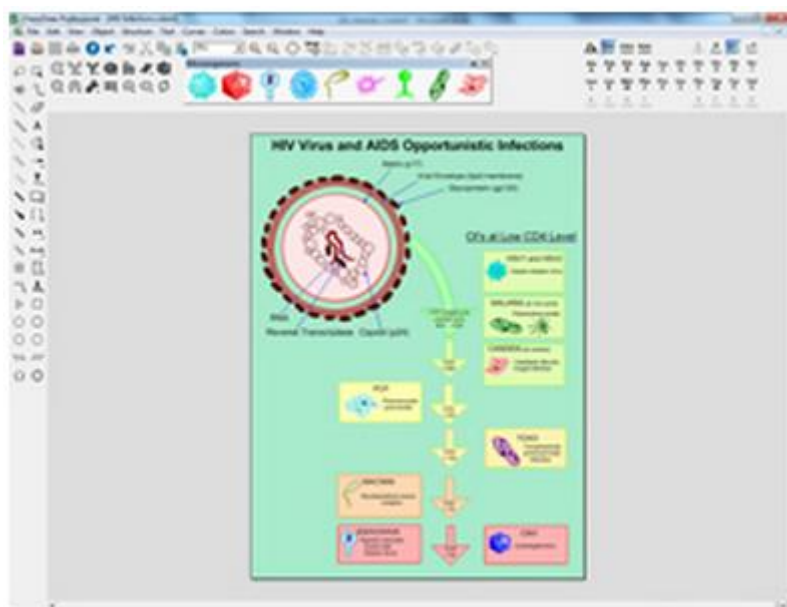


圖 3 ChemDraw Professional 包含完整的生物相關套件如生物實體圖、路徑或機制圖。