

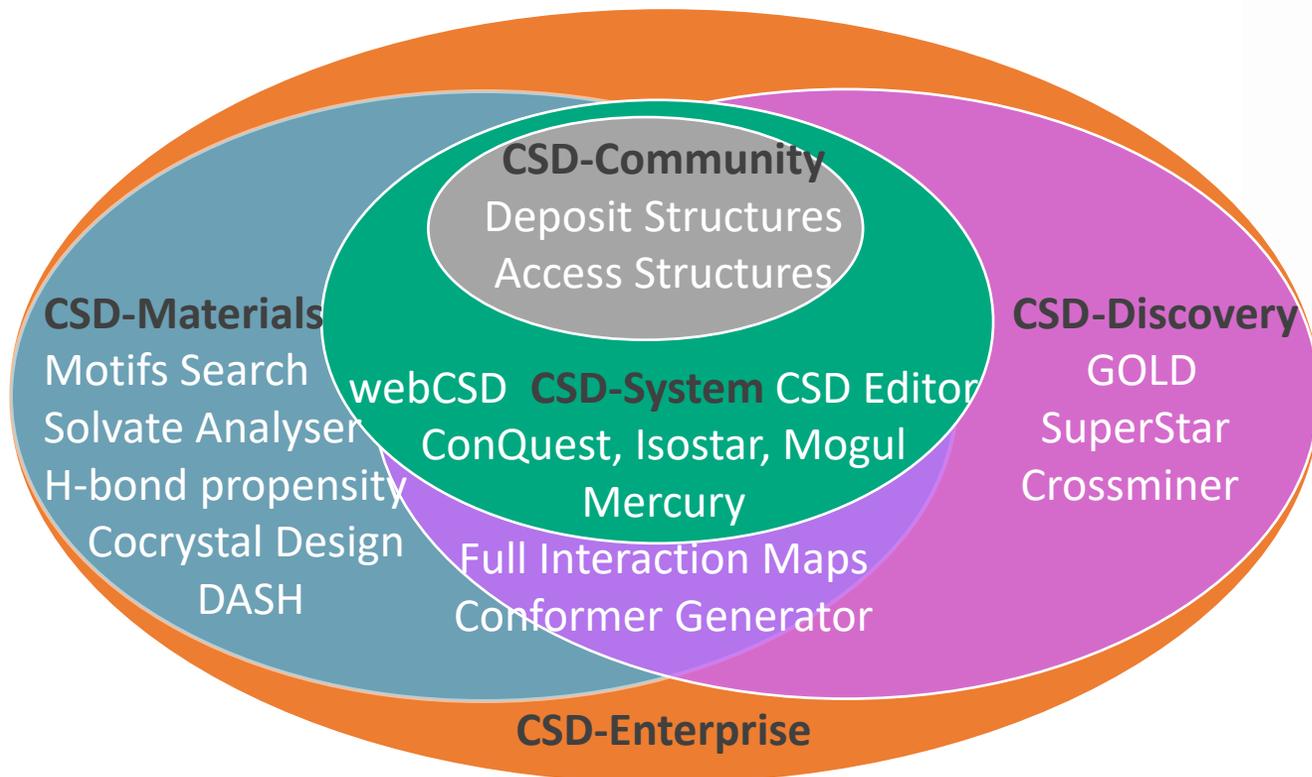
CSD-Enterprise

Программное обеспечение Кембриджского центра кристаллографических данных (CCDC)

Предназначено для исследований в области химии, биохимии, кристаллографии, фармацевтики, материаловедения и преподавания химических дисциплин

Электронные ресурсы Кембриджского центра кристаллографических данных (CCDC)

С 1965 г. CCDC занимается сбором информации о кристаллическом строении органических, элементоорганических и координационных соединений и ее распространением в виде баз данных CSD и webCSD, а также разработкой программного обеспечения для поиска, анализа и визуализации структурной информации (CSD-System), кристаллографического анализа и дизайна материалов (CSD-Materials), фармацевтических и биохимических исследований (CSD-Discovery).



- webCSD, он-лайн версия Кембриджской базы структурных данных (Cambridge Structural Database, CSD), доступна на всех компьютерах организации, IP адреса которых были переданы CCDC.
- Teaching subset – выборка из CSD, доступная свободно, для ознакомления с основными химическими понятиями.
- **Программное обеспечение CCDC можно установить на 999 персональных компьютеров сотрудников организации с использованием активационного ключа, переданного контактному лицу от организации.**

CSD-Community

Онлайн ресурсы для хранения и поиска информации о кристаллическом строении неорганических, органических, элементоорганических и координационных соединений.

 <https://www.ccdc.cam.ac.uk/deposit/upload>

Совместный сервис CCDC и FIZ Karlsruhe для кристаллографов. Депонируйте структуры, которые не планируете публиковать, как 'Private Communication'. Укажите в публикации CCDC No соединения(й).

CCDC FIZ Karlsruhe
Leibniz Institute for Information Infrastructure

  Register Sign In

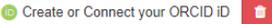
1 Login 2 Upload 3 Check Syntax 4 Validation 5 Add Publication 6 Enhance Data 7 Review 8 Submit

CIF deposition and validation service

First name(s) 

Last name(s) 

Your email address 

 Your ORCID iD  

Additional email addresses  Please add any additional email addresses

Institution (e.g. University/Company) 

Deposition number(s) for revision 

CIF/HKL/RES/FCF/Word/ZIP files 

Details  Remember my details

Options  I wish to run the IUCr *checkCIF/PLATON* service on my data 

 <https://www.ccdc.cam.ac.uk/structures/>

Совместный сервис CCDC и FIZ Karlsruhe для рецензентов статей и грантовых заявок, химиков и кристаллографов. Ищите и сохраняйте структурную информацию по CCDC No, молекулярному строению или параметрам кристаллической ячейки соединения(й).

CCDC FIZ Karlsruhe
Leibniz Institute for Information Infrastructure

Access Structures

Simple Search Structure Search Unit Cell Search Formula Search

Entry search

Welcome to Access Structures, the CCDC's and FIZ Karlsruhe's free service to view and retrieve structures. Please use one or more of the boxes to find entries. If you enter details in more than one field the search will try to find records containing all the terms entered. [More information and search help](#)

More advanced search functionality and additional curated data for the Cambridge Structural Database (CSD) and the Inorganic Crystal Structure Database (ICSD) is available through the CSD-System and ICSD, respectively. [Click here for more information.](#)

Identifier(s) 

Compound name 

DOI 

Authors 

Journal 

Publication details   

Database to search Entire published collection CSD ICSD Teaching subset

CSD-System

Многофункциональный анализ больших массивов данных



CSD

База данных о кристаллическом строении органических, элементоорганических и координационных соединений. Поддерживается с 1965 г, содержит более 1 млн записей.



Mercury

Программа визуализации и анализа любых кристаллических структур, интегрированная с модулями CSD-Materials, CSD-Discovery и CSD-Python API.



ConQuest

Инструмент поиска кристаллических структур в базе данных CSD. Позволяет более сложный и гибкий поиск, чем webCSD.



CSD Editor

База данных о структурах, создаваемая ученым, в формате, с которым может работать ПО от CCDC



webCSD

Онлайн портал доступа к базам данных о кристаллическом строении органических (CSD) и неорганических (ICSD) соединений. Пополняется ежедневно.



Mogul

База данных о молекулярной геометрии (длины связей, валентные и торсионные углы, конформации циклов), созданная на основании анализа всех структур из CSD.



Isostar

База данных о дескрипторах межмолекулярных взаимодействий, созданная на основании анализа структур из CSD и PDB (protein data bank).



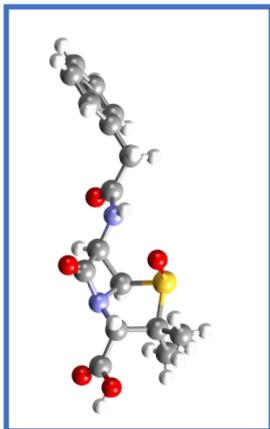
CSD-Python API

Средство создания собственных инструментов поиска и анализа кристаллографических данных.



Cambridge Structural Database (CSD)

Более 1.000.00 записей о кристаллическом строении малых молекул.

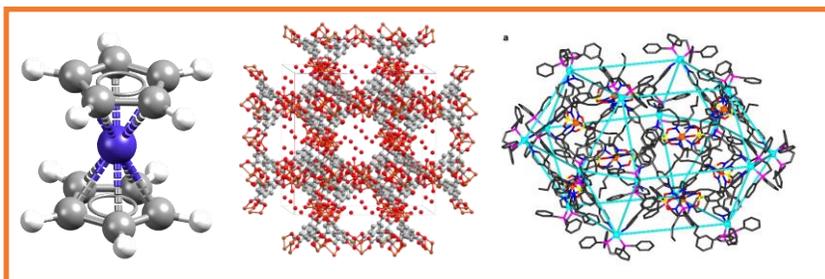


Среди органических:

- Лекарства
- Агрохимикаты
- Пигменты
- Взрывчатки
- Аминокислоты, сахара и белки

Среди металлорганических:

- Координационные полимеры
- Координационные клетки
- Пористые каркасы



Органические
43 %

Металлорганические
57 %

Неполимерные
89 %

Полимерные 11

Однокомпонентные
56 %

Многокомпонентные
44 %

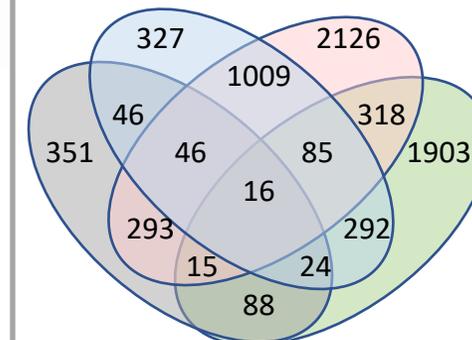
А также:

- 10860 полиморфов
- 169218 Тпл
- 23622 записи о биоактивности
- 9740 природных соединений

Однокомпонентные
1693

гидраты

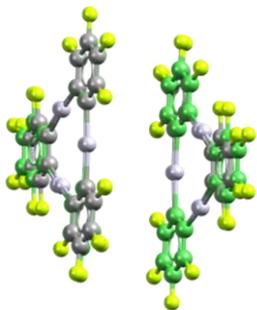
соли



сольваты сокристаллы

CSD-Materials

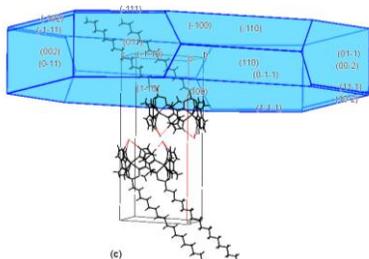
Создание новых материалов



Поиск, анализ и сравнение супрамолекулярных ассоциатов:

Оценка вероятности их образования и генетическая взаимосвязь.

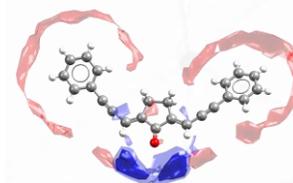
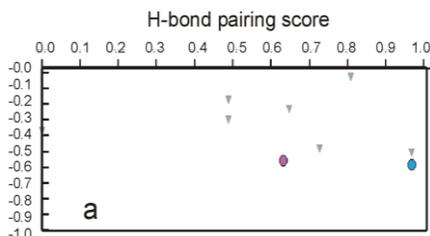
Расчеты для кристаллической формы:



Предсказание и оптимизация морфологии кристалла.
MORAC расчеты изолированных молекул.
Расчет межмолекулярных потенциалов.
Поиск пустот и оценка их объема.
Анализ взаимного расположения сольватных молекул и оценка их объема.

Оценка вероятности образования водородных связей:

Оценка склонности к полиморфизму.
Определение стабильности полиморфа.
Поиск пар, образующих сокристаллы.
Оценка склонности молекулы к образованию сольватов и гидратов.

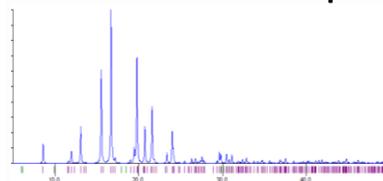


Предсказание возможных межмолекулярных взаимодействий для изолированной молекулы.

Решение кристаллической структуры по данным порошковой рентгеновской дифракции:

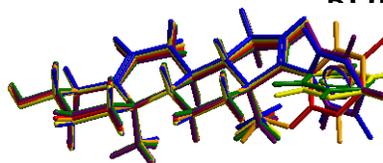
Подходит для неорганических, органических и координационных соединений.

До 24 степеней свободы, > 70 неводородных атомов, до 6 молекул в независимой части ячейки



Предсказание возможных конформаций молекулы:

Основа предсказания возможных сокристаллов, комплексов малых молекул с белками и решения кристаллической структуры по данным порошковой рентгеновской дифракции.

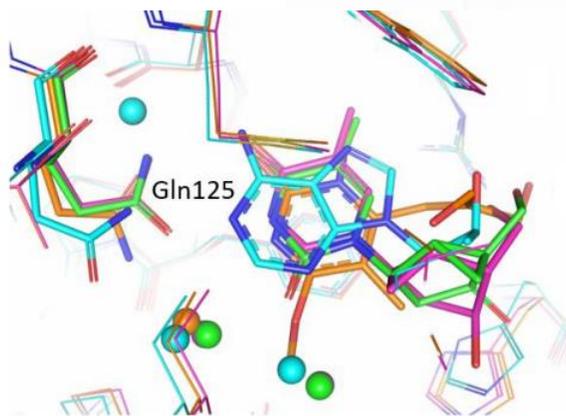


CSD-Discovery

Поиск функциональных молекул

Gold

- Докинг малых молекул в белках;
- Возможность оптимизации макромолекулы;
- Поиск положений молекул воды;
- Высокая точность и быстрота вычислений.
- Реализованы «облачные» расчеты.

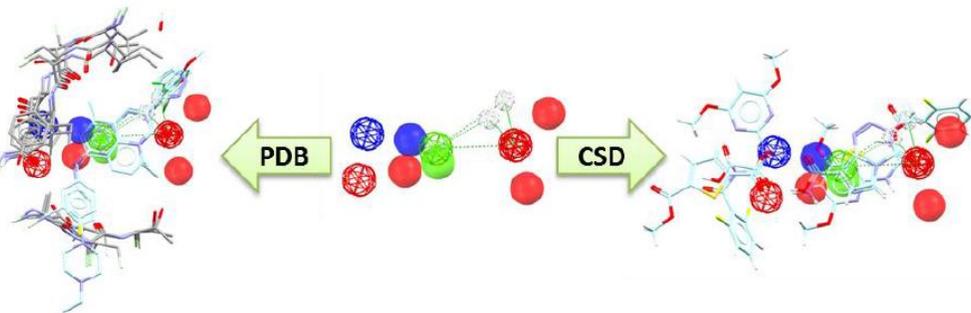


Hermes

Программа визуализации кристаллических структур макромолекул и их комплексов с лигандами, в том числе полученных молекулярным докингом и их анализа.

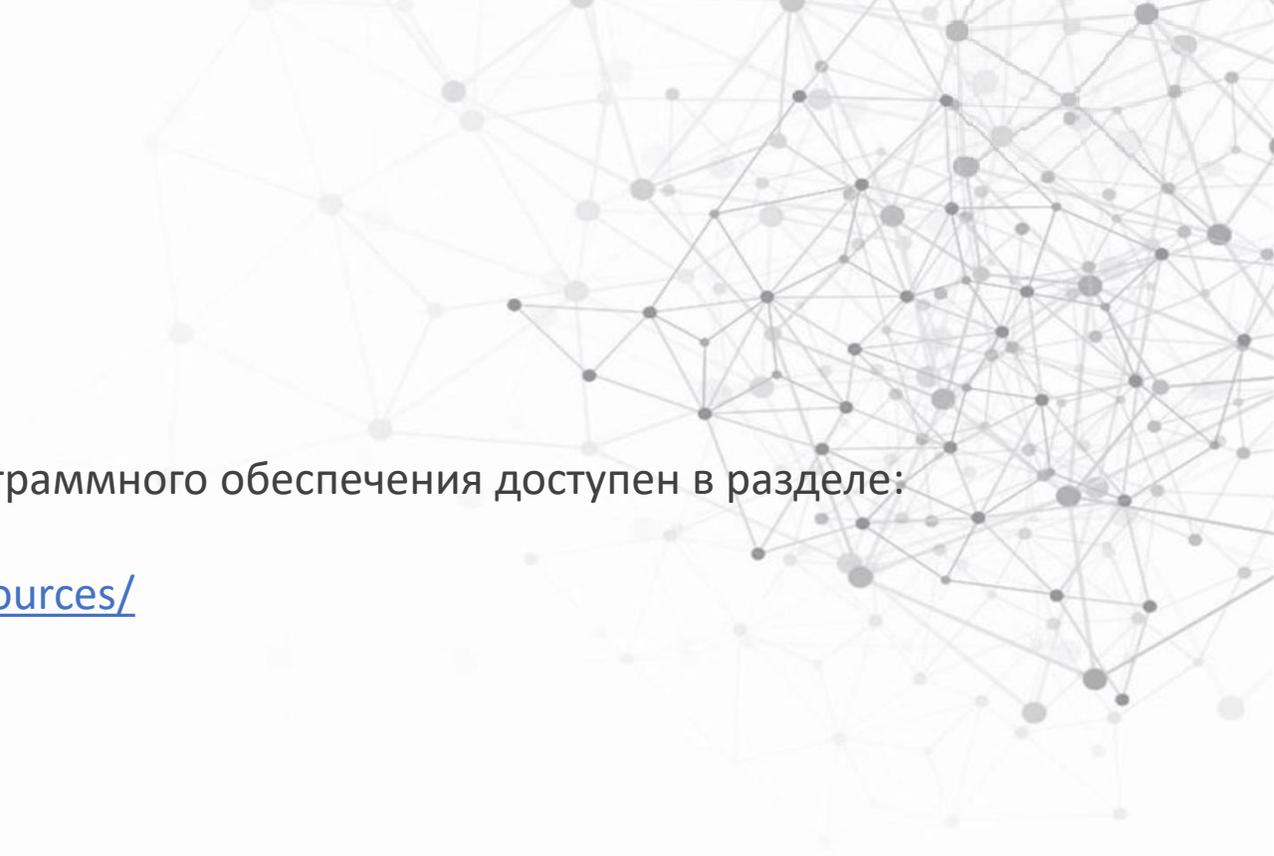
SuperStar

Сравнительный анализ малых молекул с доказанной фармацевтической активностью с целью поиска расположения активных фрагментов.



CSD-Crossminer

- Поиск малых молекул, обладающих аналогичным расположением активных фрагментов в пространстве.
- Интерактивное изменение запроса.
- Поиск в CSD и PDB.



Подробный англоязычный материал по применению программного обеспечения доступен в разделе:

<https://www.ccdc.cam.ac.uk/support-and-resources/ccdcresources/>

Обзорные работы с обсуждением применения программного обеспечения от CCDC в научных исследованиях:

Acta Crystallogr., Sect B. **2016**, 72, 171-179; <https://doi.org/10.1107/S2052520616003954>

Chemical Reviews **2019**, 119, 9427-9477; <https://pubs.acs.org/doi/10.1021/acs.chemrev.9b00155>

Crystals **2019**, 9, 478; <https://doi.org/10.3390/cryst9090478>