

Cambridge Structural Database (CSD)

База данных CSD Enterprise <https://www.ccdc.cam.ac.uk/structures/> – база данных о кристаллическом строении органических, элементоорганических и координационных соединений. Это электронный ресурс Кембриджского центра структурных данных (The Cambridge Crystallographic Data Centre / CCDC), поддерживается с 1965 г., содержит более 1 млн записей, предоставляет широкий спектр вариантов поиска кристаллических структур: по названию, химической формуле, элементному составу, литературному источнику, деталям эксперимента, фрагменту структуры.

База данных доступна в двух вариантах: онлайн-версия ([перейти](#)) и комплекс программ CSD-Enterprise ([скачать](#)). Онлайн-версия Кембриджской базы структурных данных доступна на всех компьютерах Института, а для установки стационарного ПО – нужно получить Customer Number и Activation Key в библиотеке (libr@ipc.tsc.ru).

Доступны следующие сервисы:

1) онлайн-порталы **WebCSD** и **Relibase+** (база данных кристаллических структур макромолекул) с возможностями сравнительного анализа, записи и хранения отдельных частей.

2) **CSD System**: Cambridge Structural Database, а также сервисы:

- ConQues – поиск структурных данных в CSD, позволяющий сохранение записей базы данных
- IsoStar – библиотека параметров межмолекулярных взаимодействий
- Mercury – программа для визуализации и анализа структурных данных
- Mogul – программа для валидации геометрии структур молекул.

3) **CSD Enterprise**:

- DASH – программа для анализа данных рентгеновской порошковой дифракции
- GOLD – программа молекулярного докинга
- SuperStar – программа для предсказания активных центров макромолекул
- CrossMiner – интерактивный инструмент для поиска фармакофорных признаков в БД CSD и Protein Bank Database.

Краткое руководство пользователя:

<https://podpiska.rfbr.ru/storage/instructions/webCSD.pdf>

Описание основных возможностей программного обеспечения CSD-Enterprise:

<https://podpiska.rfbr.ru/storage/materials/CSDcomponents.pdf>