

Электронные ресурсы Кембриджского центра кристаллографических данных (CCDC)

База данных CSD Enterprise - электронный ресурс Кембриджского центра структурных данных (The Cambridge Crystallographic Data Centre / CCDC).

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

В рамках национальной подписки государственные (бюджетные) учреждения науки и высшего образования Российской Федерации могут получить доступ к следующим сервисам:

1) Web SCD: 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:

- ConQuest (поиск структурных данных в CSD, позволяющий сохранение записей базы данных).
- IsoStar (библиотека параметров межмолекулярных взаимодействий).
- Mercury (программы для визуализации и анализа структурных данных).
- Mogul (программы 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).

База данных Cambridge Structural Database доступна в двух версиях:

- стационарное ПО (1 034 174 записи о кристаллическом строении 1 016 168 органических и металлоорганических соединений на 01.01.2010, дополняется три раза в год).
- онлайн-версия (дополняется ежедневно, дополнительно содержит 180 000 записей о строении неорганических соединений и минералов).

Стационарное ПО:

Программное обеспечение CCDC можно установить на персональные компьютеры сотрудников организации с использованием активационного ключа (по заявке в Техподдержку ДВФУ).

Для получения активационного ключа необходимо обратиться с запросом на электронную почту shustova.vl@dvfu.ru.

Скачать комплекс программ CSD-Enterprise можно по адресу: <https://www.ccdc.cam.ac.uk/support-and-resources/csdsdownloads>:

ввести email, Customer Number (для ДВФУ - 2540), Activation Key (получить по email shustova.vl@dvfu.ru). На почту придут ссылки на скачивание ПО в трех вариантах: для Windows, Linux, Mac. Далее нужно скачать ПО для Вашей операционной системы и установить его с использованием тех же Customer Number и Activation Key.

Описание основных возможностей программного обеспечения CSD-Enterprise: <https://podpiska.rfbr.ru/storage/materials/CSDcomponents.pdf>

Краткое руководство пользователя онлайн-портала Web CSD: <https://podpiska.rfbr.ru/storage/instructions/webCSD.pdf>

Контактная информация:
Шустова Ветта Леонидовна,
Научная библиотека
email: shustova.vl@dvfu.ru