

Cambridge Structural Database (CSD)

База данных [Cambridge Structural Database \(CSD\)](#) содержит более 500 тыс. кристаллических структур низкомолекулярных органических и элементоорганических веществ.

В базе данных *отсутствуют*:

- полипептиды и полисахариды, имеющие в своей структуре более 24 звеньев (эти структуры хранятся в [Protein Data Bank](#)),
- олигонуклеотиды (эти структуры накапливает [Nucleic Acids Data Bank](#)),
- неорганические структуры (хранятся в [Inorganic Crystal Structure Database](#)),
- металлы и сплавы (хранятся в [CRYSTMET](#)).

Информация для CSD извлекается в основном из периодической научной печати; меньшая доля поступает непосредственно от исследователей.

Если кристаллическую структуру помещают в CSD, то в статье-первоисточнике указывают **Deposition Number** — регистрационный номер этой структуры в формате CCDC xxxxxx, например:

	I	II
Formula	C ₂₅ H ₂₆ Cl ₈ O ₇ Ti ₃	C ₂₅ H ₂₆ Cl ₆ O ₆ Ti ₂
($\Delta\rho$) _{max/min} /eÅ ⁻³	0.681/−0.417	0.310/−0.252
CCDC	684925	684926

регистрационные номера структур

фрагмент статьи

Такой регистрационный номер может пригодиться для информационного поиска в CSD (см. следующую страницу).

Кроме того, вещества в базе данных имеют и буквенно-числовой идентификатор. Например, идентификатор анилина — BAZGOY.

При той степени доступа, которая имеется у нас, для ведения информационного поиска необходимо знание именно этих идентификаторов.

Информация, хранящаяся в CSD, в полном объеме доступна только на платной основе. Веб-интерфейс базы данных называется [WebCSD](#).

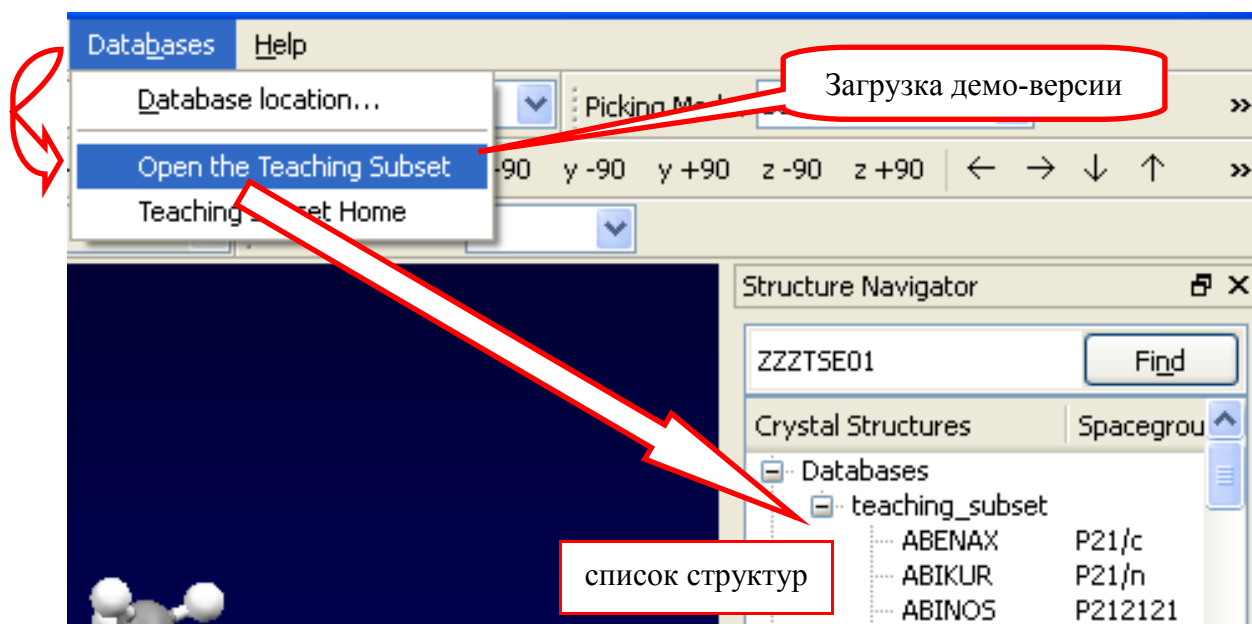
Демо-версия

CSD предоставляет неограниченный бесплатный доступ к [CSD Teaching Subset](#) — демо-версии, содержащей кристаллические структуры 500 веществ.

Эти же 500 структур прилагаются к [Mercury](#) — офлайновой бесплатной программе визуализации кристаллических структур.

И в онлайн-версии, и в офлайновой демо-версиях *CSD Teaching Subset* отсутствуют функции поиска по названию вещества или по его структурной формуле — структуру можно искать только по буквенно-числовому идентификатору, о котором речь шла выше. Если идентификатор неизвестен, приходится работать методом *Browse* — перебирать весь список, надеясь на удачу.

Демо-версия CSD в Mercury:



Содержимое CSD Teaching Subset проиндексировано химической поисковой системой ChemSpider.

ChemSpider умеет извлекать информацию по названию вещества, по химической формуле, поэтому поиск кристаллографического описания заданного вещества через ChemSpider может оказаться более эффективным, чем перебор структур в исходной базе данных. (О кристаллографической информации в ChemSpider [смотрите здесь](#)).

Ограниченный доступ к основной базе данных

С некоторыми осложнениями и оговорками, к основной части базы данных CSD тоже имеется бесплатный доступ — структуры, опубликованные **после 1994** года, можно получить по электронной почте.

Для этого необходимо зайти на [страницу заказа](#), далее, прочитывая соответствующие пояснения и указания, по ссылкам перейти к бланку, на котором следует привести сведения о запрашиваемой структуре.

Существенно, что в бланке требуется указать не название вещества, а библиографические сведения о статье, в которой были опубликованы кристаллографические данные, а также **Deposition Number** — регистрационный номер запрашиваемой структуры.

Таким образом, заказчик должен первоначально провести поиск в первоисточниках, найти нужную статью, прочитать ее полный текст, найти регистрационный код вещества — и только после этого имеет смысл посылать заказ в CSD.

Запрашиваемая структура высылается заказчику по электронной почте.
(Примечание: Эта операция нами не проверялась).