
Nova versión e actualización da Cambridge Structural Database

- Actualizado (17.11.2005)

O día 22 de marzo de 2005, instalouse a versión de novembro de 2004 e a primeira actualización do 2005 da base de datos de CSD. En total, contén 338.445 entradas na base de datos.

A máquina para acceder segue sendo a mesma do ano anterior (csd.cesga.es), pero fíxose unha actualización do sistema operativo que non debería afectar aos usuarios xa rexistrados.

A Cambridge Structural Database é unha base de datos de estruturas químicas (fundamentalmente orgánicas)

Usuarios habituais: Químicos inorgánicos, orgánicos e teóricos.

Usuarios potenciais: Químicos e físicos, que traballen na síntese ou caracterización de estruturas moleculares e desexen comparar coas estruturas identificadas na bibliografía.

GUIA DE USO:

O software está instalado no servidor csd.cesga.es. Unha vez obtida unha conta de usuario, cos datos de login e password, pódense conectar ao sistema. Para conectarse é preciso dispor dun cliente ssh. Un cliente para Windows (Putty) pode atoparse neste enlace. Para visualizar a saída gráfica de programas que dispoñan desta posibilidade, é preciso conectarse co comando `ssh -X`, o que fixará automaticamente a variable de entorno DISPLAY ao equipo dende o que nos esteamos conectando. Para activar esta posibilidade utilizando o cliente Putty, é preciso ir ao menú Connection -> SSH -> Tunnels e activar a opción "Enable X11 forwarding", e, ademais, será necesario ter instalado e funcionando un cliente X-Windows coma o X-Win32. O programa recomendado para facer as buscas é o ConQuest que se activa co comando `cq`. As vantaxes deste sistema son que é posible visualizar a estrutura do composto ademais de gardar as buscas realizadas.

Se quere coñecer o contido da nova actualización, no programa ConQuest (arráncase co comando `cq`), seleccione as opcións View Databases -> Entries in CSD version 5.26 ou View Databases -> Entries in CSD > version 5.26 updates. Lembrámoslle que a base de datos Cambridge Structural Database (CSD) está instalada nunha máquina dedicada, polo que se precisa acceder a esa base de datos e non ten aínda acceso, terá que solicitárllelo aos nosos técnicos.

Se ten algún problema co programa ou actualización, non dubide en poñerse en contacto connosco a través de , indicando no asunto "Erro en CSD".