

Nova versión e actualización de Cambridge Structural Database (CSD)

- Actualizado (30.01.2006)

O día 26 de xaneiro de 2006, instalouse a versión de novembro de 2005 e a primeira actualización do 2006 da base de datos de CSD. En total, contén 368.481 entradas na base de datos.

A máquina para acceder segue sendo a mesma que o ano anterior (csd.cesga.es). Actualmente e ata o 28 de Febreiro de 2006 estarán operativas as dúas versións (novembro 2004 e novembro 2005) e a versión por defecto será a antiga (novembro 2004). Para usar a nova versión é necesario executar:

```
source /datos/CSD/bin/usecsd06
```

A Cambridge Structural Database é unha base de datos que recolle información bibliográfica, química e cristalográfica de compostos orgánicos e organometálicos obtida mediante difracción de raios X e difracción de neutróns.

Usuarios habituais: Químicos inorgánicos, orgánicos e teóricos.

Usuarios potenciais: Químicos e físicos, que traballen en síntese ou caracterización de estruturas moleculares e necesiten comparar con estruturas identificadas en bibliografía.

Información adicional: <http://www.ccdc.cam.ac.uk/products/csd>

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, pódese conectar ao sistema. Para se conectar é necesario dispor dun cliente ssh. Un cliente para Windows (Putty) pode obterse nesta dirección: <http://www.chiark.greenend.org.uk/%7Eesgtatham/putty/download.html>.

Para visualizar a saída gráfica de programas que dispogan desta posibilidade, é preciso conectarse co comando ssh -X, o cal fixará automaticamente a variable de contorno DISPLAY ao equipo desde onde nos estamos a conectar. 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 como o cygwin ou X-Win32. Información detallada de como realizar isto se pode encontrar no seguinte enlace (http://www.cesga.es/File/Computacion/FAQS/CESGA_Cygwin.pdf).

O programa recomendado para facer as busquedas é o ConQuest que se activa co comando cq. As vantaxes deste sistema son a posibilidade de visualizar a estrutura do composto ademais de gardar as busquedas realizadas.

Se se quere coñecer o contido da nova actualización, no programa ConQuest (comando cq), selecciónese as opcións View Databases -> Entries in CSD version 5.27 ou View Databases -> Entries in CSD > version 5.27 updates. Lembrar que a base de datos Cambridge Structural Database (CSD) está instalada nunha máquina dedicada, polo que se se precisa acceder a esta base de datos e non se ten aínda acceso, deberá solicitarse aos nosos técnicos.

Programas incluídos en CSD:

ConQuest - Principal interface do CSD.

Mercury - Visualización e exploración de estruturas cristalinas.

VISTA - Análise estatístico de xeometrías e outros datos.

IsoStar - Base de Coñecemento de interaccións intermoleculares.

Mogul - Base de Coñecemento de xeometrías moleculares.

PreQuest - Creación de bases de datos locais en formato CSD.

Ante algún problema co programa ou a actualización, non dubide en porse en contacto connosco a través de , indicando no asunto "Error en CSD".