

Nueva versión y actualización de Cambridge Structural Database (CSD)

- Modificado (30.01.2006)

El día 26 de enero de 2006, se instaló la versión de noviembre de 2005 y la primera actualización del 2006 de la base de datos de CSD. En total, contiene 368.481 entradas en la base de datos.

La máquina para acceder sigue siendo la misma que el año anterior (csd.cesga.es). Actualmente y hasta el 28 de Febrero de 2006 estarán operativas las dos versiones (noviembre 2004 y noviembre 2005) y la versión por defecto será la antigua (noviembre 2004). Para usar la nueva versión es necesario ejecutar:

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

La Cambridge Structural Database es una base de datos que recoge información bibliográfica, química y cristalográfica de compuestos orgánicos y organometálicos obtenida mediante difracción de rayos X y difracción de neutrones.

Usuarios habituales: Químicos inorgánicos, orgánicos e teóricos.

Usuarios potenciales: Químicos y físicos, que trabajen en síntesis o caracterización de estructuras moleculares y necesiten comparar con estructuras identificadas en bibliografía.

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

GUIA DE USO:

El software está instalado en el servidor csd.cesga.es. Una vez obtenida una cuenta de usuario, con los datos de login y password, se puede conectar al sistema. Para conectarse es necesario disponer de un cliente ssh. Un cliente para Windows (Putty) puede obtenerse en esta dirección:

<http://www.chiark.greenend.org.uk/%7Esgtatham/putty/download.html>.

Para visualizar la salida gráfica de programas que dispogan de esta posibilidad, es preciso conectarse con el comando `ssh -X`, el cual fijará automáticamente la variable de entorno `DISPLAY` al equipo desde donde nos estamos conectando. Para activar esta posibilidad utilizando el cliente Putty, es preciso ir al menú `Connection -> SSH -> Tunnels` y activar la opción "Enable X11 forwarding", y, además, será necesario tener instalado y funcionando un cliente X-Windows como el `cygwin` o `X-Win32`. Información detallada de como realizar esto se puede encontrar en el siguiente enlace (http://www.cesga.es/File/Computacion/FAQS/CESGA_Cygwin.pdf).

El programa recomendado para hacer las búsquedas es el `ConQuest` que se activa con el comando `cq`. Las ventajas de este sistema son la posibilidad de visualizar la estructura del compuesto además de guardar las búsquedas realizadas. Si se quiere conocer el contenido de la nueva actualización, en el programa `ConQuest` (comando `cq`), seleccionese las opciones `View Databases -> Entries in CSD version 5.27` o `View Databases -> Entries in CSD > version 5.27 updates`. Recordar que la base de datos Cambridge Structural Database (CSD) está instalada en una máquina dedicada, por lo que si se precisa acceder a esta base de datos y no se tiene todavía acceso, deberá solicitarse a nuestros técnicos.

Programas incluidos en CSD:

ConQuest - Principal interfaz del CSD.

Mercury - Visualización y exploración de estructuras cristalinas.

VISTA - Análisis estadístico de geometrías y otros datos.

IsoStar - Base de Conocimiento de interacciones intermoleculares.

Mogul - Base de Conocimiento de geometrías moleculares.

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

Ante algún problema con el programa o la actualización, no dude en ponerse en contacto con nosotros a través de ,
indicando en el asunto "Error en CSD".