Nova actualización de Cambridge Structural Database (CSD)

- Actualizado (17.11.2005)

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 precisen comparar con estruturas identificadas en bibliografía.

O día 14 de Xuño de 2005, instalouse a actualización de Maio do 2005 da dase de datos do CSD contendo 9322 novas estruturas e dando un total de 347.763 entradas na base de datos
Información adicional: http://www.ccdc.cam.ac.uk/products/csd
Máquina de acceso: csd.cesga.es
GUÍA DE USO:

O software está instalado no servidor csd.cesga.es. Unha vez obtida unha conta de usuario, cos datos de login e password, pode conectarse ao sistema. Para conectarse é preciso dispoñer dun cliente ssh. Un cliente para Windows (Putty) pode obterse na dirección: http://www.chiark.greenend.org.uk/%7Esgtatham/putty/download.html

Para visualizar a saída gráfica de programas que dispoñan desta posibilidade, é preciso conectarse co comando ssh -X, que fixará automaticamente a variable de entorno DISPLAY ao equipo dende onde nos estamos 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 preciso ter instalado e funcionando un cliente X-Windows como o X-Win32.

O programa recomendado para facer as buscas 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 buscas realizadas.

Se se quere coñecer o contido da nova actualización, no programa ConQuest (comando cq), deben seleccionarse as opcións View Databases -> Entries in CSD version .26 ou View Databases -> Entries in CSD > version 5.26 updates.

Debemos lembrar que a base de datos Cambridge Structural Database (CSD) está instalada nunha máquina dedicada, polo que se se precisan acceder a esta base de datos e non teñen aínda acceso, deberán solicitarllo aos nosos técnicos. Ante algún problema co programa ou coa actualización, non dubiden en pórse en contacto connosco a través de indicando no asunto da mensaxe "Error en CSD".