Nova actualización de Cambridge Structural Database (CSD)

- Actualizado (17.11.2005)

A actualización da base de datos do CSD (Cambridge Structural Database) correspondente a agosto de 2005 atópase instalada no CESGA dende o pasado día 17. Esta actualización contén 7304 novas estruturas. Deste xeito, son xa 355.067 as entradas dispoñibles no CSD.

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. Os seus usuarios habituais son químicos inorgánicos, orgánicos e teóricos, e, os seus usuarios potenciais, químicos e físicos que traballen en síntese ou caracterización de estruturas moleculares e precisen comparalas con estruturas identificadas en bibliografía.

Para obter información adicional, visite http://www.ccdc.cam.ac.uk/products/csd

Máquina de acceso: csd.cesga.es
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 conectarse é preciso dispor dun cliente ssh. Un cliente para Windows (Putty) pódese obter neste enderezo: 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, o cal fixará automaticamente a variable do contorno DISPLAY ao equipo dende 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 preciso ter instalado e funcionando un cliente X-Windows como o X-Win32. O programa recomendado para facer as buscas é 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), selecciónense as opcións View Databases -> Entries in CSD version 5.26 ou View Databases -> Entries in CSD > version 5.26 updates. Hai que recordar que a base de datos Cambridge Structural Database (CSD) estea instalada nunha máquina dedicada, polo que se se precisa acceder a esta base de datos e non se ten acceso aínda, deberase solicitar aos nosos técnicos.

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