
Nova versión da base de datos CSD

- Actualizado (17.11.2005)

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.

O día 29 de xaneiro de 2004, instalouse a versión de novembro de 2003 e a primeira actualización do 2004 da base de datos de CSD. En total contén 306.873 entradas na base de datos. Ademais, a aplicación migrou de máquina para ter un acceso máis rápido a ela, fundamentalmente da versión gráfica (cq) que é a recomendada. A nova máquina de aloxamento é csd.cesga.es. O usuario e a clave son os mesmos que tiñan no sistema vello.

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, poden conectarse ao sistema. Para conectarse é necesario 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 5.25`. Lembrámoslle que a base de datos Cambridge Structural Database (CSD) está instalada nunha máquina dedicada, polo que se precisan acceder a esa base de datos e aínda non teñen acceso, terán que solicitarllo aos nosos técnicos.

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