

Nova versión e actualización da Cambridge Structural Database (CSD)

- Last Updated (14.02.2007)

O día 1 de febreiro de 2007, instalouse a versión de 5.28 o 2007 e a primeira actualización de xaneiro 2007 da base de datos de CSD. En total, contén 403790 entradas na base de datos.

A máquina para acceder segue sendo a mesma que o ano anterior (csd.cesga.es).

A instalación desta versión actualmente non inclúe isostar. A versión de isostar do 2006 está completamente operativa pero, se por calquera motivo, se necesitase o uso da versión 2007 non dude en contactarnos.

Actualmente e hasta o 28 de Febreiro de 2006 estarán operativas as dúas versións (2006 e 2007) e a versión por defecto será a antiga (2006). Para usar a nova versión é necesario executar:

```
source usecsd07
```

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 conectarse é necesario dispoñer dun cliente ssh. Un cliente para Windows (Putty) pode obterse nesta 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`, o que fixará automaticamente a variable de entorno DISPLAY ao equipo desde 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 necesario ter instalado e funcionando un cliente X-Windows como o cygwin o X-Win32. Información detallada de como realizar isto pódese atopar no seguinte enlace (http://www.cesga.es/File/Computacion/FAQS/CESGA_Cygwin.pdf).

O programa recomendado para facer las 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`), selecciónese as opcións View Databases -> Entries in CSD version 5.28 o View Databases -> Entries in CSD > version 5.28 updates. Lembrar que a base de datos Cambridge Structural Database (CSD) está instalada nunha máquina adicada, por lo que se se precisa acceder a esta base de datos e non se ten aínda acceso, deberá solicitarselle aos nosos técnicos.

Programas incluídos en CSD:

ConQuest - Principal interfaz 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 calquera problema co programa ou coa actualización, non dubide en poñerse en contacto con nos a través de aplicacions@cesga.es, indicando no asunto "Error en CSD".