Cambridge Structural Database: Ολοκληρωμένο αποθετήριο αναγνωρισμένων και επιμελημένων οργανικών και μεταλλο-οργανικών κρυσταλλικών δομών μικρών μορίων

Έχοντας ιδρυθεί το 1965 και με ιστορικές δομές που χρονολογούνται από τη δεκαετία του 1920, η Cambridge Structural Database (CSD) περιέχει πάνω από 1,1 εκατομμύρια ακριβείς τρισδιάστατες δομές με δεδομένα από αναλύσεις περίθλασης ακτίνων X και νετρονίων και πρόσθετη επιμέλεια από το CCDC. Η βάση δεδομένων χρησιμοποιείται από ερευνητές από τις φαρμακευτικές, αγροχημικές καθώς και τις χημικές βιομηχανίες, προκειμένου να προβλεφθούν και να καθοδηγηθούν μελλοντικές ανακαλύψεις.

Πλήρως ιχνηλατίσιμη και προσβάσιμη, η CSD είναι ένα απαραίτητο αξιόπιστο επιστημονικό εργαλείο, που παρέχει πληροφορίες για μεγάλα δεδομένα, χρησιμοποιώντας ισχυρούς αλγόριθμους για μοριακή ανάλυση. Είναι αποθετήριο δεδομένων με πιστοποίηση CoreTrustSeal.

Οι οργανικές κρυσταλλικές δομές περιλαμβάνουν:

- Φάρμακα και φαρμακευτικά προϊόντα
- Αγροχημικά
- Χρωστικές
- Εκρηκτικά
- Πρωτεϊνικούς συνδέτες.

Οι μεταλλο-οργανικές κρυσταλλικές δομές περιλαμβάνουν:

- Μεταλλικά Οργανικά Πλαίσια (MOFs)
- Μοντέλα για νέους καταλύτες
- Πορώδεις σκελετούς αποθήκευσης αερίου
- Βασικούς χημικούς δεσμούς.

<u>Χαρακτηριστικά</u>

Αξιόπιστη παρουσίαση της χημικής δομής

Πλήρως ιχνηλατίσιμη και αξιόπιστη, τα πειραματικά δεδομένα υπόκεινται σε επιπλέον επιμέλεια, ώστε να περιλαμβάνουν δεδομένα από πρόσθετες πηγές - για παράδειγμα κοινά ονόματα, βιοδραστικότητα, φυσική προέλευση, διασταύρωση με άλλα εναντιομερή μόρια ή ρακεμικά μείγματα ή πολύμορφα. Αυτά τα πρόσθετα δεδομένα επιτρέπουν την εύκολη ομαδοποίηση, ενισχύοντας ακόμα περισσότερο την ιχνηλασιμότητα και την αξία του ως πυλώνα γνώσης. Οι δομές με αταξία ατόμων παρουσιάζονται με ακρίβεια, χάρη στην επιμέλεια του CCDC.

Πλήρως εμπειρική

Τα δεδομένα της πραγματικής ζωής δίνουν αξιόπιστες πληροφορίες και επιστημονικότατα στη διδασκαλία.

Σημαντικότερη από το άθροισμα των επιμέρους στοιχείων της

Τα δεδομένα από μια συλλογή 1,1 εκατομμυρίου δομών μπορούν να συγκριθούν, αναλυθούν και ομαδοποιηθούν για να αναδειχθούν ομοιότητες, τάσεις και κατευθυντήριες οδηγίες για περαιτέρω ανάλυση και πειραματισμό. Είναι σχεδόν απεριόριστα πιο αξιόλογα από τις μεμονωμένες δομές που βρίσκονται απομονωμένες.

Διαλειτουργικότητα και επαναληψιμότητα

Όλες οι δομές που κατατίθενται ηλεκτρονικά διαθέτουν δικό τους DOI που βοηθά στην εφαρμογή των αρχών FAIR για διαλειτουργικότητα και επαναληψιμότητα των δεδομένων.

Αναζήτηση και εξαγωγή γνώσεων

Το λογισμικό επιτρέπει να εργαστείτε με τα δεδομένα της CSD για την εξαγωγή νέων γνώσεων. Αυτό περιλαμβάνει δημόσια και ιδιόκτητα, πειραματικά και προβλεπόμενα δεδομένα.

Στοχεύστε αναζητήσεις σε δομές ενδιαφέροντος

Προϋπολογισμένα υποσύνολα της CSD για εξειδικευμένους τομείς της χημείας που επιτρέπουν στους ερευνητές να στοχεύουν αναζητήσεις σε δομές ενδιαφέροντος.

Cambridge Structural Database: The Comprehensive Repository of Validated and Curated Small Molecule Organic and Metal-organic Crystal Structures

Established in 1965 with historical structures dating back to the 1920s, the Cambridge Structural Database (CSD) now contains over 1.1M accurate 3D structures with data from X-ray and neutron diffraction analyses and additional curation from the CCDC. The database is used by researchers across the pharmaceutical, agrochemical, and fine chemicals industries to predict and guide future discoveries.

Fully discoverable and accessible, the CSD is an essential trusted scientific resource giving big-data insights using powerful algorithms for molecular analysis. A CoreTrustSeal certified data repository.

Organic crystal structures include:

- Drugs and pharmaceuticals
- Agrochemicals
- Pigments
- Explosives
- Protein ligands.

Metal-Organic crystal structures include:

- Metal Organic Frameworks (MOFs)
- Models for new catalysts
- Porous frameworks for gas storage
- Fundamental chemical bonding.

Features

Validated chemical representation

Fully discoverable and trusted, the experimental data is further curated to include data from additional sources - for example common names, bioactivity, natural source, cross-reference to other enantiomers or racemates or polymorphs. This additional data allows easy grouping further enhancing discoverability and value as a knowledge base. Disordered structures are clearly represented owing to CCDC curation.

Fully empirical

Real world data brings trusted data insights and science to life for teaching.

Greater than the sum of its parts

The data from a collection of 1.1M structures can be compared, analysed and grouped to show common themes, trends and guides for further analysis and experimentation. Almost infinitely more valuable than the individual structures in isolation.

Interoperable and re-usable

All electronically deposited structures have their own DOI which helps for FAIR principles of interoperability and re-use of data.

Search and extract knowledge

CCDC software enables scientists to work with the CSD structural data to extract new insights. This includes public and proprietary, experimental and predicted data.

Target searches to structures of interest

Pre-calculated subsets of the CSD for specialist areas of chemistry that allow researchers to target searches to structures of interest.