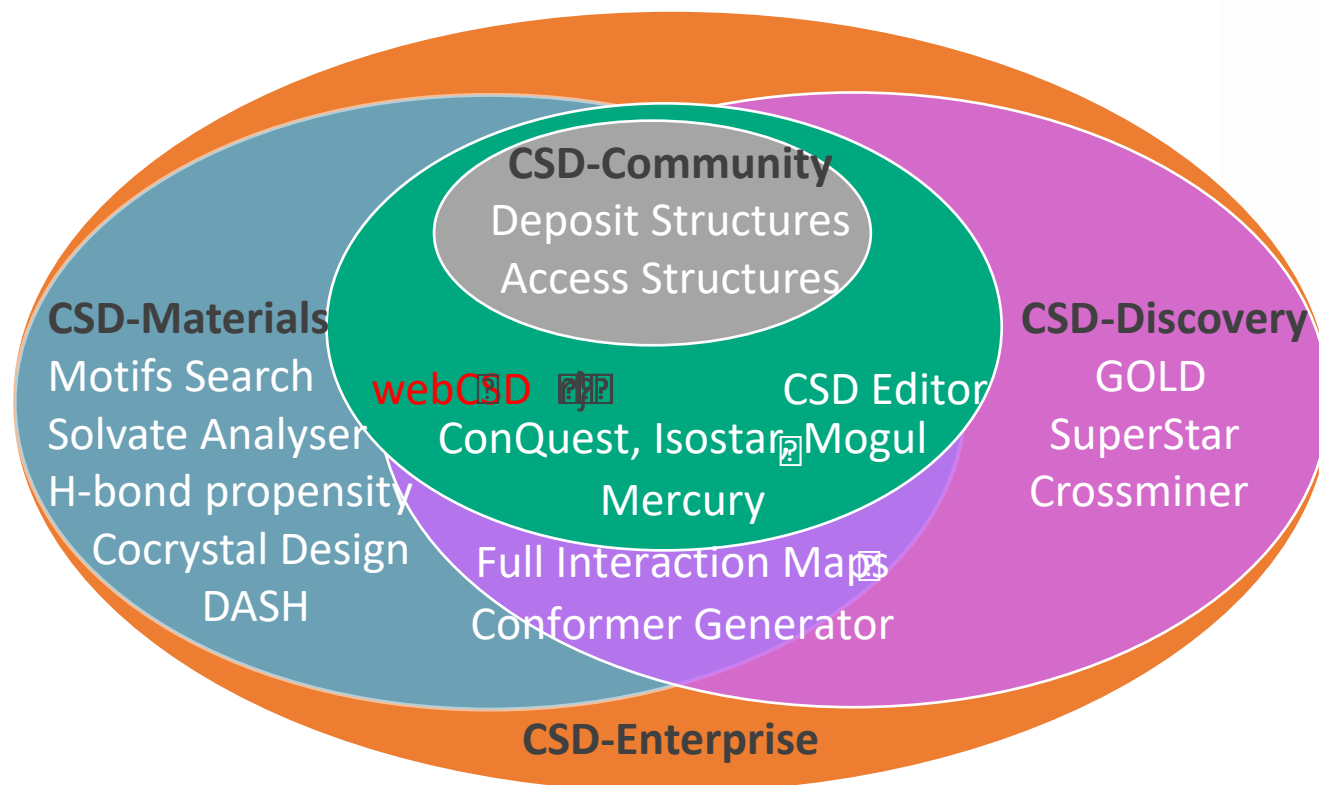


# webCSD

Краткое руководство пользователя

# Электронные ресурсы Кембриджского центра кристаллографических данных (CCDC)

С 1965 г. CCDC занимается сбором информации о кристаллическом строении органических, элементоорганических и координационных соединений и ее распространением в виде баз данных CSD и webCSD, а также разработкой программного обеспечения для поиска, анализа и визуализации структурной информации (CSD-Core), кристаллографического анализа и дизайна материалов (CSD-Materials), фармацевтических и биохимических исследований (CSD-Discovery).



- webCSD, онлайн версия Кембриджской базы структурных данных (Cambridge Structural Database, CSD), доступна на всех компьютерах организации, IP адреса которых были переданы CCDC.
- Teaching subset – выборка из CSD, доступная свободно, для ознакомления с основными химическими понятиями.
- Программное обеспечение CCDC можно установить на 999 персональных компьютеров сотрудников организации с использованием активационного ключа, переданного контактному лицу.

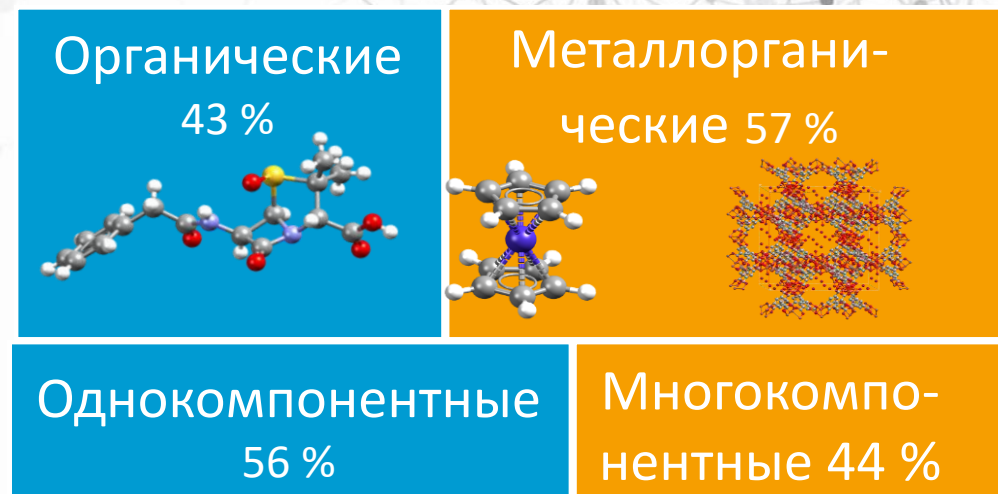
webCSD: [ccdc.cam.ac.uk/structures](http://ccdc.cam.ac.uk/structures)

## Структура CSD

Онлайн поиск информации о кристаллическом строении неорганических (> 200.000), органических и координационных (> 1.100.000) соединений.

Просмотр, анализ и экспорт данных.

Гиперссылки на исходные статьи и другие базы данных о свойствах соединений.



- В том числе:
- Лекарства
  - Агрохимикаты
  - Пигменты
  - Взрывчатки
  - Аминокислоты
  - Сахара
  - Природные соединения
  - Гидраты
  - Соли
  - Сольваты
  - Сокристаллы
  - Полиморфы
  - Условия кристаллизации
  - Записи о Tпл
  - Информация о биоактивности
  - Магнитные свойства
  - Стабильность

# Текстовый поиск (Simple Search)\*

1. Введите известную текстовую информацию
2. Уточните, в какой из баз данных вести поиск
3. Введите при необходимости дополнительные параметры поиска (полиморф, растворитель, биоактивность и др.)
4. Начните поиск.

The screenshot shows the 'Simple Search' tab of the WebCSD interface. At the top, there are four tabs: 'Simple Search', 'Structure Search', 'Unit Cell Search', and 'Formula Search'. Below the tabs is a header 'Simple text and numeric searching' and a welcome message: 'Welcome to WebCSD. This service now includes the ability to search for inorganic structures through the CCDC's and FIZ Karlsruhe's joint Access Service using the Simple Search tab. Please use one or more of the boxes to find entries. If you enter details in more than one field the search will try to find records containing all the terms entered. More information and search help'. The search form contains several input fields: 'Identifier(s)' (with a blue circle '1' next to it), 'Compound name', 'DOI', 'Authors', 'Journal', and 'Publication details' (which includes 'Year', 'Volume', and 'Page' sub-fields). Below these is the 'Database to search' section with radio buttons for 'Entire published collection' (selected), 'CSD', 'ICSD', and 'Teaching subset', with a blue circle '2' next to it. There is also a 'Phase transitions' field with a blue circle '3' next to it. At the bottom, there is a '+ Add New Search Field' dropdown and a blue 'Search' button with a blue circle '4' next to it, and a 'Clear' button on the right.

\* Доступен свободно.

\* Поиск в базах данных о неорганических (ICSD) и органических (CSD) соединениях.

\* Только на английском языке.

# Поиск структурных фрагментов (Structure Search)\*

1. Выберите редактор структур.
  2. Нарисуйте структурный фрагмент или введите SMARTS формулу.
  3. Уточните тип поиска (точное соответствие или поиск молекул, содержащих данный фрагмент).
  4. Начните поиск.
- A. Выбор химического элемента.  
B. Выбор типа химической связи.  
C. Выбор нестандартных колец.  
D. Темплаты (функциональные группы, 3D клетки, нуклеотиды и др.).  
E. Уточнение заряда атома, количества связанных с ним атомов, включая водород (по клику правой кнопкой мыши на атоме).

The screenshot shows the 'Structure Search' interface with the following components and annotations:

- 1**: Points to the 'Elemental' and 'CSD Sketcher' tabs.
- 2**: Points to the central workspace containing a chemical structure of a bicyclic amine.
- 3**: Points to the 'Match condition' section, where 'Substructure' is selected.
- 4**: Points to the 'Search' button at the bottom.
- A**: Points to the vertical element selection menu (C, N, O, S, H, F, Cl, Br).
- B**: Points to the bond type selection menu.
- C**: Points to the ring selection menu.
- D**: Points to the template selection menu.
- E**: Points to the context menu for 'Query features'.

On the right side, there is a 'Help' panel with the following content:

**Keyboard shortcuts**

- Copy: **Ctrl-C**
- Delete: **Ctrl-X**
- Paste: **Ctrl-V**
- Undo: **Ctrl-Z**
- Redo: **Ctrl-Y**
- Select all: **Ctrl-A**

**Query features**

Query features describe how an atom or bond should behave in substructure searches. To add a feature:

1. Right click on atom or bond
2. Hover over 'query features' (atom only)
3. Hover over a feature type (e.g. H-count, type)
4. Select one of the options

More Information

\* Доступен только по подписке.

\* Поиск в базе данных CSD.

# Поиск по параметрам ячейки (Unit Cell Search)\*

1. Выберите решетку Бравэ.
2. Введите параметры кристаллической ячейки ( $a$ ,  $b$ ,  $c$  в [Å];  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$  в [°]).
3. При необходимости уточните величину отклонений от введенных значений параметров.
4. Начните поиск.

The screenshot shows the 'Unit Cell Search' interface with four numbered annotations:

- 1**: 'Lattice centring' dropdown menu set to 'Primitive (P)'. A blue circle with the number '1' is next to it.
- 2**: A blue rounded rectangle highlights the input fields for lattice parameters  $a$ ,  $b$ ,  $c$  and angles  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$ . Each field contains 'e.g. 10.0' or 'e.g. 90.0' and has a help icon. A blue circle with the number '2' is next to the first field.
- 3**: A blue circle with the number '3' is next to the 'Advanced' button, which is a downward arrow icon.
- 4**: A blue circle with the number '4' is next to the 'Search' button.

The interface includes tabs for 'Simple Search', 'Structure Search', 'Unit Cell Search', and 'Formula Search'. Below the tabs is a 'Unit Cell Searching' header. The 'Tolerances' section has 'Length tolerance' set to 1.5 and 'Angle tolerance' set to 2.0. A 'Clear' button is located at the bottom right.

\* Доступен только по подписке.

\* Поиск в базе данных CSD.

# Поиск по формуле (Formula Search)\*

1. Введите химическую формулу соединения.\*\*
2. Выберите, возможно ли наличие других химических элементов в молекуле.
3. Проведите поиск.

The screenshot shows the 'Formula Search' tab selected in a search interface. The search bar contains the text 'e.g. C8 H9 N1 O2'. Below the search bar is a checkbox labeled 'Allow other elements in the molecule' which is currently unchecked. A blue 'Search' button and a grey 'Clear' button are visible at the bottom of the search area. Three blue circular callouts with white numbers 1, 2, and 3 are overlaid on the interface: callout 1 points to the 'Molecular Formula' label, callout 2 points to the checkbox, and callout 3 points to the 'Search' button.

Simple Search   Structure Search   Unit Cell Search   **Formula Search**

Formula Searching

Enter the molecular formula you would like to search for in the box below.

Elements should be followed by a whole number, a range of numbers or greater than or less than. Any elements not followed by any number will default to 1. Ranges should be specified by a dash and less than or greater than with < or >. Charges may also be specified. See our [FAQ](#) for more information.

**1** Molecular Formula

**2** Allow other elements in the molecule

**3** Search

\* Доступен только по подписке.

\* Поиск в базе данных CSD.

\*\* Цифра может быть целым числом, обозначать диапазон (через тире), или значение больше (>) или меньше (<) какого-либо числа

# Результат поиска\*

Simple Search Structure Search Unit Cell Search Formula Search

Your query was: Compound name: imatinib and the search returned 9 records.

Modify Search New Search


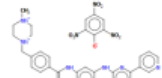
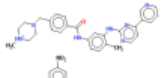
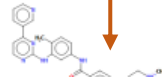

При необходимости скорректируйте поиск

Выбор результатов поиска

Select all Download Selected View Selected

Поиск дал информацию о 9 соединениях

Экспорт выбранных данных

<input checked="" type="checkbox"/>	CUKGEX		Deposition Number(s): 2001497 Space Group: P $\bar{1}$ (2) Cell: a 9.1546(9)Å b 10.5414(11)Å c 15.1767(17)Å, $\alpha$ 93.361(9)° $\beta$ 93.674(8)° $\gamma$ 90.464(8)° Compound Name: 1-methyl-4-((4-((4-methyl-3-((4-(pyridin-3-yl)pyrimidin-2-yl)amino)phenyl)carbamoyl)phenyl)methyl)piperazin-1-ium methanesulfonate Synonyms: <b>Imatinib</b> mesylate	
<input checked="" type="checkbox"/>	DUNTIQ		Deposition Number(s): 765172 Space Group: P $\bar{1}$ (2) Cell: a 8.560000Å b 10.734000Å c 23.060000Å, $\alpha$ 96.74(3)° $\beta$ 92.69(2)° $\gamma$ 101.46(7)° Compound Name: 1-Methyl-4-(4-((4-methyl-3-((4-(pyridin-3-yl)pyrimidin-2-yl)amino)phenyl)carbamoyl)benzyl)piperazinediium bis(2,4,6-trinitrophenolate) Synonyms: <b>Imatinibium</b> dipicrate	
<input checked="" type="checkbox"/>	RAYQEP		Deposition Number(s): 838894 Space Group: P $\bar{1}$ (2) Cell: a 9.8646(18)Å b 11.458(2)Å c 16.203(3)Å, $\alpha$ 92.038(3)° $\beta$ 91.672(3)° $\gamma$ 109.007(3)° Compound Name: N-(4-methyl-3-((4-(pyridin-3-yl)pyrimidin-2-yl)amino)phenyl)-4-[(4-methylpiperazin-1-yl)methyl] benzamide 2,4,6-trinitrophenolate Synonyms: <b>Imatinib</b> picrate	
<input checked="" type="checkbox"/>	XAVTOF		Deposition Number(s): 821868 Space Group: P $\bar{1}$ (2) Cell: a 9.3362(6)Å b 9.8621(6)Å c 18.0236(6)Å, $\alpha$ 81.298(4)° $\beta$ 90.019(4)° $\gamma$ 63.106(8)° Compound Name: 1-Methyl-4-(4-((4-methyl-3-((4-(pyridin-3-yl)pyrimidin-2-yl)amino)phenyl)carbamoyl)benzyl)piperazin-1-ium methanesulfonate Synonyms: <b>Imatinib</b> mesylate, DrugBank: DB00619	

CCDC No (взят из публикации)

Параметры ячейки

Гиперссылка на исходную публикацию

Структурная формула

Название по IUPAC и тривиальное

\* На примере текстового поиска по названию противоопухолевого препарата 'imatinib'



# Информация о соединении\*

1. CSD Refcode и CCDC No соединения. Его экспорт.
2. Название и параметры ячейки.
3. Структурная формула.
4. 3D вид.
5. Ссылки на внешние источники. См. слайды 10-11.

Results	
<input checked="" type="checkbox"/> Database Identifier	Deposition Number
<input checked="" type="checkbox"/> XAVTOF	821868

1 [Download](#)

- A. Открытие на полный экран.
- B. Вращение молекулы.
- C. Модель представления (шаростержневая, стержневая и др.)
- D. Названия атомов.
- E. Выбор изображения молекулы или кристаллической ячейки.
- F. Измерение длин связей, валентных и торсионных углов.

XAVTOF : 1-Methyl-4-(4-((4-methyl-3-((4-(pyridin-3-yl)pyrimidin-2-yl)amino)phenyl)carbamoyl)benzyl)piperazin-1-ium methanesulfonate

Space Group:  $P \bar{1} (2)$ , Cell:  $a$  9.3362(6)Å  $b$  9.8621(6)Å  $c$  18.0236(6)Å,  $\alpha$  81.298(4)°  $\beta$  90.019(4)°  $\gamma$  63.106(8)°

2

3D viewer

4

Chemical diagram

3

H Disorder Menu Open A

Style Labels Packing Measure

Ball and Stick No Labels None Distance C D E F

Additional details


5

\* На примере соединения с кодом {XAVTOF} – текстовый поиск по ‘Identifier’ или клик по названию в результатах поиска на предыдущей странице.

# Дополнительная информация (Additional details)\* Drug Bank

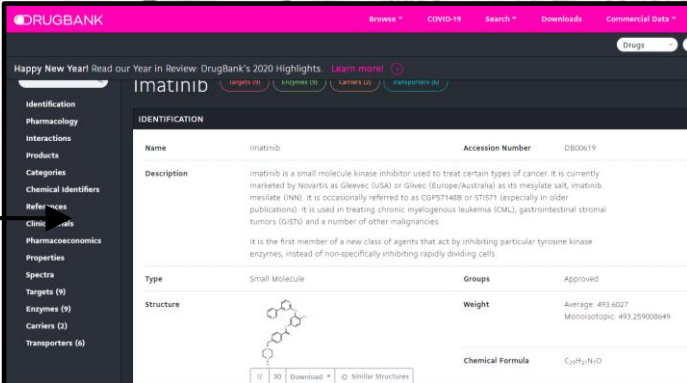
Additional details	
Deposition Number	821868
Data Citation	Damián Grillo, Griselda Polla, Daniel Vega CCDC 821868: Experimental Crystal Structure Determination, 2012, DOI: <a href="https://doi.org/10.5517/ccwl6wj">10.5517/ccwl6wj</a>
Synonyms	<b>Imatinib mesylate</b> , DrugBank: DB00619
Deposited on	14/04/2011

Associated publications	
	Damián Grillo, Griselda Polla, Daniel Vega, <i>Journal of Pharmaceutical Sciences</i> , 2012, 101, 541 <a href="https://doi.org/10.1002/jps.22772">DOI: 10.1002/jps.22772</a>

Chemical details	
Formula	$C_{29}H_{32}N_7O^+ \cdot C_3H_3O_3S^-$
Bioactivity	A small molecule kinase inhibitor prescribed to cancer patients with the Philadelphia chromosome translocation; Imatinib mesylate was investigated in 2020 as a potential candidate to target COVID-19 (coronavirus)



## Исходная публикация



Информация о температуре плавления, биоактивности, магнитных и люминесцентных свойствах (если есть).

\* На примере соединения с кодом {XAVTOF}

# Дополнительная информация (Additional details)\*

## Foods Data Bank

Crystal details	
Space group	P 2 <sub>1</sub> (4)
Unit cell	<b>a</b> 4.8430(10)Å <b>b</b> 10.290(2)Å <b>c</b> 11.853(2)Å $\alpha$ 90° $\beta$ 99.31(3)° $\gamma$ 90°
Cell volume	582.91
Reduced cell	<b>a</b> 4.843Å <b>b</b> 10.290Å <b>c</b> 11.853Å $\alpha$ 90.000° $\beta$ 99.310° $\gamma$ 90.000°
Z, Z'	2, 1
Habit	needle
Colour	colorless
Natural source	from Capparis spinosa (Capparidaceae)

Информация об  
элементарной ячейке  
Информация о  
полиморфизме, фазовых  
переходах, природном  
источнике (если есть)

Experimental details	
R-factor (%)	7.09
Temperature (K)	300
Density (CCDC)	1.523
Radiation probe	x-ray
Experiment type	single crystal

Links	
FooDB	FDB003554
PubChem	60961

PubChem

\* На примере соединения с кодом {ADENOS12}



Более подробный англоязычный материал по онлайн поиску в базе данных доступен по ссылке:  
[https://www.ccdc.cam.ac.uk/support-and-resources/ccdcresources/Access\\_structures.pdf](https://www.ccdc.cam.ac.uk/support-and-resources/ccdcresources/Access_structures.pdf)