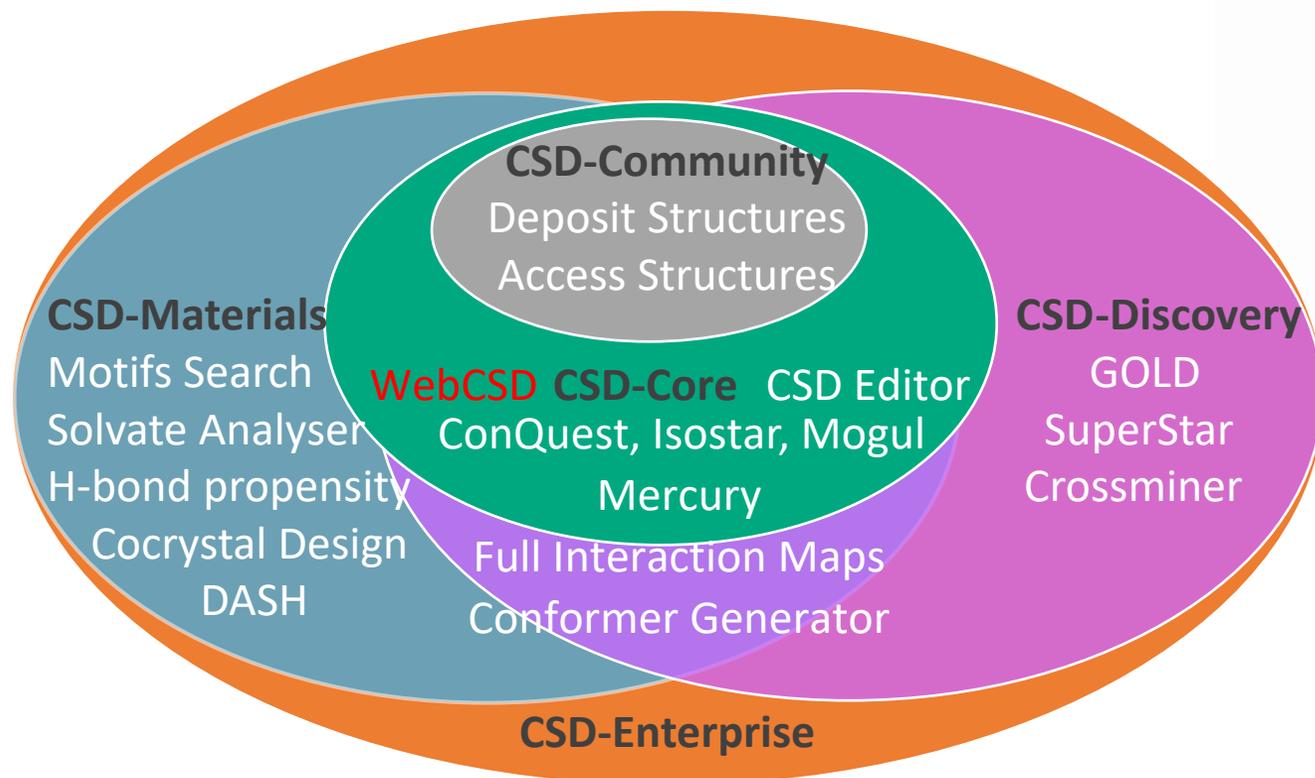


WebCSD

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

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
 - 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.

* 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 callouts:

- 1**: Points to the 'Elemental' and 'CSD Sketcher' tabs.
- 2**: Points to the central drawing area containing a bicyclic structure with a nitrogen atom.
- 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 the nitrogen atom, with 'Query features' selected.

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

- 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

At the bottom right of the interface, there is a 'More Information' button.

* 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]; α , β , γ в [°]).
3. При необходимости уточните величину отклонений от введенных значений параметров.
4. Начните поиск.

The screenshot shows the 'Unit Cell Search' interface with the following elements:

- 1** Lattice centring: Primitive (P)
- 2** Unit cell parameters: a , b , c (Length tolerance: 1.5) and α , β , γ (Angle tolerance: 2.0)
- 3** Tolerances: Length tolerance (1.5) and Angle tolerance (2.0)
- 4** Search button

Additional interface elements include: Simple Search, Structure Search, Unit Cell Search, Formula Search, Unit Cell Searching, Advanced, and Clear buttons.

* 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 located at the bottom right of the search area. Three blue circular callouts with white numbers are overlaid on the interface: '1' is positioned above the search bar, '2' is positioned to the left of the checkbox, and '3' is positioned below 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

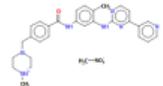
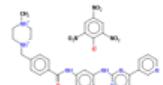
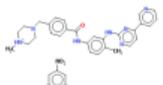
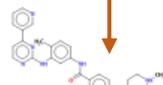
При необходимости скорректируйте поиск

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, α 93.361(9)° β 93.674(8)° γ 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: Imatinib 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, α 96.74(3)° β 92.69(2)° γ 101.46(7)° Compound Name: 1-Methyl-4-(4-((4-methyl-3-((4-(pyridin-3-yl)pyrimidin-2-yl)amino)phenyl)carbamoyl)benzyl)piperazinedium bis(2,4,6-trinitrophenolate) Synonyms: Imatinibium 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, α 92.038(3)° β 91.672(3)° γ 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: Imatinib 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, α 81.298(4)° β 90.019(4)° γ 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: Imatinib 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, α 81.298(4)° β 90.019(4)° γ 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

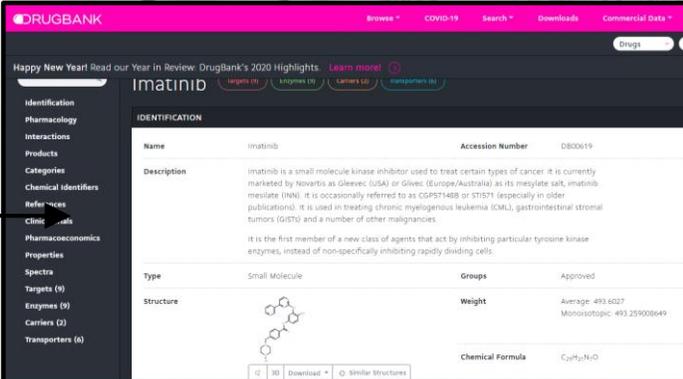
* На примере соединения с кодом {XAVTOF} – текстовый поиск по ‘Identifier’ или клик по названию в результатах поиска на предыдущей странице.

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: 10.5517/ccwl6wj
Synonyms	Imatinib mesylate , DrugBank: DB00619
Deposited on	14/04/2011

Associated publications	
	Damián Grillo, Griselda Polla, Daniel Vega, <i>Journal of Pharmaceutical Sciences</i> , 2012, 101, 541 DOI: 10.1002/jps.22772

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 ₁ (4)
Unit cell	a 4.8430(10)Å b 10.290(2)Å c 11.853(2)Å α 90° β 99.31(3)° γ 90°
Cell volume	582.91
Reduced cell	a 4.843Å b 10.290Å c 11.853Å α 90.000° β 99.310° γ 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

Showing Compound Adenosine (FDB003554)

Record Information

Version	1.0
Creation date	2010-04-08 22:05:51 UTC
Update date	2020-09-17 15:38:13 UTC
Primary ID	FDB003554
Secondary Accession Numbers	Not Available

Chemical Information

FooDB Name: Adenosine

Description: Adenosine, also known as adenocard or ade-rib, belongs to the class of organic compounds known as purine nucleosides. Purine nucleosides are compounds comprising a purine base attached to a ribosyl or deoxyribosyl moiety. A ribonucleoside composed of a molecule of adenine attached to a ribofuranose moiety via a beta-N(9)-glycosidic bond. Adenosine is a drug which is used as an initial treatment for the termination of paroxysmal supraventricular tachycardia (psvt), including that associated with accessory bypass tracts, and is a drug of choice for terminating stable, narrow-complex supraventricular tachycardias (svt), also used as an adjunct to thallous chloride 1:20:1 myocardial perfusion scintigraphy (thallium stress test) in patients who are unable to exercise adequately, as well as an adjunct to vagal maneuvers and clinical assessment to establish a specific diagnosis of undefined, stable, narrow-complex svt. Adenosine is a strong basic compound (based on its pKa). Adenosine exists in all living species, ranging from bacteria to humans. Within humans, adenosine participates in a number of enzymatic reactions. In particular, adenosine can be converted into inosine, which is mediated by the enzyme adenosine deaminase. In addition, adenosine can be converted into adenine and ribose 1-phosphate, which is mediated by the enzyme purine nucleoside phosphorylase. In humans, adenosine is involved in thioquinone action pathway. Outside of the human body, Adenosine is found, on average, in the highest concentration within beers and milk (cow). Adenosine has also been detected, but not quantified, in several different foods, such as capers, new zealand spinachs, welsh onions, hickory nuts, and pepper (spice). This could make adenosine a potential biomarker for the consumption of these foods. Adenosine is a potentially toxic compound.

PubChem

PubChem CID: 60961

Structure: 2D, 3D, Crystal

Find Similar Structures

Chemical Safety: Irritant. Laboratory Chemical Safety Summary (LCSS) Datasheet

Molecular Formula: C₁₀H₁₂N₄O₄

Synonyms: adenosine, SS-61-7, Adenocard, Adenoscan, Adenine riboside

* 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