



	CSD-Community	CSD-System	CSD-Discovery	CSD-Materials	CSD-Enterprise
Data					
CSD deposited and curated data	Y ¹	Y	Y	Y	Y
CSD teaching resources	Y	Y	Y	Y	Y
Proprietary CSD extension		Y	Y	Y	Y
Deposit					
Guided data deposition	Y	Y	Y	Y	Y
CIF syntax check	Y	Y	Y	Y	Y
Reduced cell check	Y	Y	Y	Y	Y
Data validation	Y	Y	Y	Y	Y
CSD DOI and curated CSD entry on publication	Y	Y	Y	Y	Y
Direct publication through <i>CSD Communications</i>	Y	Y	Y	Y	Y
Enhanced data discoverability	Y	Y	Y	Y	Y
Persistent, free storage of your data	Y	Y	Y	Y	Y
Deposition portal allowing you to access, edit and share your deposits	Y	Y	Y	Y	Y
Access					
Retrieve via bibliographic info, DOI, CSD identifiers or compound name	Y	Y	Y	Y	Y
Link from published articles and repositories	Y	Y	Y	Y	Y
Publisher referee services	Y	Y	Y	Y	Y
Search					
Search by chemical formula, cell parameters, 2D/3D substructure, similarity, and more...		Y	Y	Y	Y
Protein-ligand binding sites			Y		Y
Visualise					
3D display and manipulation	Y	Y	Y	Y	Y
High resolution graphics and movie generation	Y	Y	Y	Y	Y
3D printing file output	Y	Y	Y	Y	Y
PXRD pattern simulation	Y	Y	Y	Y	Y
PXRD pattern comparison		Y	Y	Y	Y
Molecule and structure editing		Y	Y	Y	Y
2D diagram generation		Y	Y	Y	Y
Analyse					
Plotting and charting		Y	Y	Y	Y
Descriptive statistics		Y	Y	Y	Y
Interactive visualisation		Y	Y	Y	Y
Filtering and categorisation		Y	Y	Y	Y
Reporting		Y	Y	Y	Y

Conformations					
Bond length assessment		Y	Y	Y	Y
Valence angle assessment		Y	Y	Y	Y
Torsion angle assessment		Y	Y	Y	Y
Ring geometry assessment		Y	Y	Y	Y
Conformer generation			Y	Y	Y
Interactions					
Fragment interaction maps (<i>IsoStar</i>)		Y	Y	Y	Y
Protein interaction maps (<i>SuperStar</i>)			Y		Y
Full interaction maps			Y	Y	Y
Ligand-based drug discovery					
Ligand overlay			Y		Y
Field-based ligand screener			Y		Y
Scaffold hopping			Y		Y
Structure-based drug discovery					
Protein-ligand docking			Y		Y
Ensemble docking			Y		Y
Pose analysis			Y		Y
Proprietary structures			Y		Y
Cavity similarity searching			Y		Y
Solid form analysis					
Motif searching				Y	Y
Packing feature searching				Y	Y
Crystal packing similarity				Y	Y
Calculations				Y	Y
Hydrogen bond propensity				Y	Y
Hydrate analysis				Y	Y
Co-crystal design				Y	Y
Structure solution from powder diffraction data (<i>DASH</i>)				Y	Y
CCDC services					
On-site training		+	+	+	+
Custom script development		+	+	+	+
In-house database building		+	+	+	+
Solid form risk assessment	+	+	+	+	+
Co-crystal design	+	+	+	+	+
Virtual screening	+	+	+	+	+

¹Essential curated information for each entry is freely available through Access Structures on the CCDC website. More enhanced curated information is available through CSD-System, CSD-Discovery, CSD-Materials and CSD-Enterprise

+ Services are available – contact the CCDC for more information

info@ccdc.cam.ac.uk
www.ccdc.cam.ac.uk
UK: +44 1223 336408

Doc no. 106CSDE18