

CSD Product Datasheet 2017

	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
Access:					
Retrieve via DOI or CSD Identifiers	Y	Y	Y	Y	Y
Retrieve via bibliographic info, DOI, CSD Identifiers, 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
Proteins (<i>Relibase/Relibase+</i>)	Y ²		Y		Y ²
Visualize:					
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
Molecule and structure editing		Y	Y	Y	Y
2D diagram generation		Y	Y	Y	Y
PXRD pattern simulation	Y	Y	Y	Y	Y
PXRD pattern comparison				Y	Y
Analyse:					
Plotting and charting		Y	Y	Y	Y
Descriptive statistics		Y	Y	Y	Y
Interactive visualization		Y	Y	Y	Y
Filtering and categorization		Y	Y	Y	Y
Reporting		Y	Y	Y	Y

	CSD-Community	CSD-System	CSD-Discovery	CSD-Materials	CSD-Enterprise
Conformations:					
Bond length assessment		Y	Y	Y	Y
Valence angle assessment		Y	Y	Y	Y
Torsion angle assessment		Y	Y	Y	Y
Ring assessment		Y	Y	Y	Y
Conformer generator			Y	Y	Y
Interactions:					
Fragment interaction maps		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
Proteins (GOLD/Relibase):					
Protein-ligand docking			Y		Y
Ensemble studies			Y		Y
Pose analysis			Y		Y
Protein structure retrieval	Y ²		Y		Y ²
Proprietary structures			Y		Y ²
Cavity similarity search			Y		Y ²
Solid form studies:					
Packing similarity search				Y	Y
Packing feature search				Y	Y
Packing motif search				Y	Y
Powder pattern solution (<i>DASH</i>)				Y	Y
Hydrogen bond propensity				Y	Y
Hydrate analysis				Y	Y
Co-crystal design				Y	Y
Platforms:					
Desktop interface	Y ³	Y	Y	Y	Y
Web interface	Y	Y	Y	Y	Y
CSD Python API		Y	Y	Y	Y
CCDC services:					
On-site training		+	+	+	+
Custom script development		+	+	+	+
In-house database building		+	+	+	+
Solid form risk assessment	+	+	+	+	+
Crystal form prediction	+	+	+	+	+
Co-crystal design	+	+	+	+	+
Virtual screening	+	+	+	+	+

¹ Essential curated information for each entry including 2D chemical diagram 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

² Free version of a macromolecular database (Relibase) is available for academic users from www.ccdc.cam.ac.uk/relibase
The enhanced version, Relibase+, is distributed to industrial users with CSD-Discovery and CSD-Enterprise

³ Free Mercury interface is available from www.ccdc.cam.ac.uk/free_services/mercury
+ Service available – contact CCDC for more information

info@ccdc.cam.ac.uk www.ccdc.cam.ac.uk

UK: +44 1223 336408 US: +1 (848) 445-4893



The Cambridge Crystallographic
Data Centre