

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 Χ 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.

Χαρακτηριστικά

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 επιστημονικότητα 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.