CSD 剑桥晶体数据库

剑桥晶体数据中心(CCDC, Cambridge Crystallographic Data Centre)自 1965 年起就从事晶体数据的收集、整理与计算机化工作。该中心发展的**剑桥结构数据库 CSD**(The Cambridge Structural Database, 简称为 CSD)是基于 X 光和中子衍射实验唯一的小分子及金属有机分子晶体的结构数据库。

剑桥结构数据库收录了全世界范围内所有已认可的有机及金属有机化合物的晶体结构。通过一整套丰富的搜索与分析工具及衍生的数据库, 用户可以进行分子结构, 分子间相互作用以及晶胞堆积的研究, 从而为许多先进领域的研究与应用提供方便。

剑桥结构数据库含有约 1,200,000 余个有机及金属有机化合物的 X 射线和中子射线衍射的分析数据。本数据库不仅全面涵盖了已发表的分子晶体结构, 同时也独特的收录了大量在其它任何地方无法获得的分子结构数据。数据库中的每一条信息都包括:

- 三维结构数据: 原子坐标、晶胞参数、空间群、结构精密度指标、温度与压力条件、无序分布细节
- 二维结构图: 原子和键的性质与关联
- 化学式和化合物名称, 多肽化合物的氨基酸序列
- 完整的文献资料, 其中部分直接与电子版文献连接
- 交叉引用立体异构体及有关重新解释和确认的详情
- 其它已发表的与该分子有关的信息: 化合物来源、结晶条件、结对构型的确定实验、多晶型现象(同质多像)及生物活性

该数据库中所有的分子结构都经过了广泛、细致的查证，并提供了详尽的化学和文献方面的信息，从而更加提高了晶体结构数据的价值。该数据库不断收录最新发表的数据信息，并以年 9% 的增长率不断更新。

CSD 包括功能完整的应用软件，不仅具有数十种查询化合物的方法，还提供了分子结构信息统计方法和三维图像演示方法，以帮助研究人员寻找、观察、分析和总结有关的化合物信息。CSDS 软件分为基本软件系统和图形软件系统。

应用范围：

- 搜索、显示晶体结构
- 分析分子参数
- 研究构象取向
- 搜索药效团模型
- 检测分子内和分子间相互作用
- 快捷地提取与分析分子的几何结构
- 预测分子间相互作用
- 确认特定官能团间相互作用的模式
- 检索相似的晶胞堆积特性
- 计算晶胞堆积相似度等

CSD 每年有三次数据更新，CCDC 每年年底发布新版本的 CSD。

CSD 操作平台：Windows/UNIX/LINUX/Mac OS。

CSD 网页版访问地址：<https://www.ccdc.cam.ac.uk/structures/>