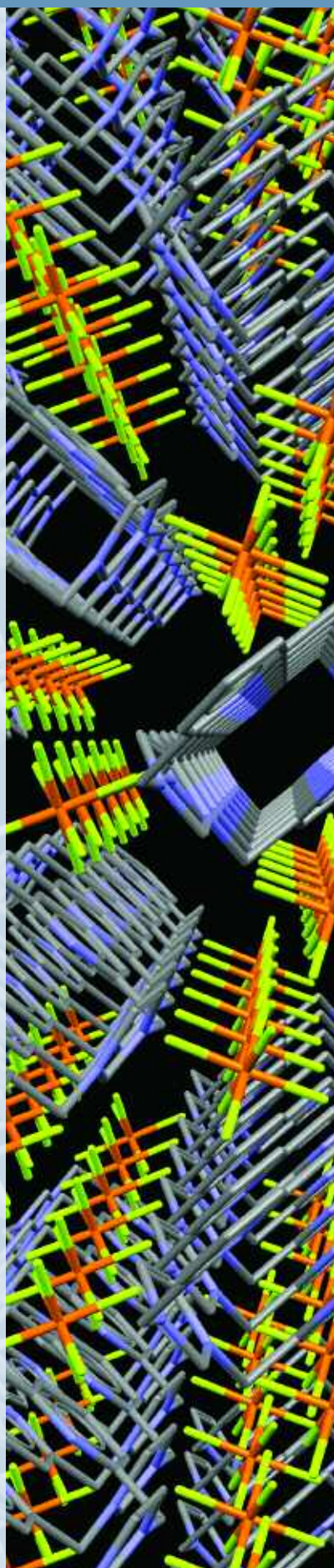


剑桥结构数据库系统 [The Cambridge Structural Database System]

对实验晶体结构的了解和探索



剑桥结构数据库 (CSDS) 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寻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。

剑桥数据库系统的应用范围:

- 搜寻与图像显示晶体结构
- 分析分子参数
- 研究构像取向
- 探索药效团模型
- 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**

剑桥数据库系统由以下六部分组成:

- ConQuest
- Mercury
- Mogul
- IsoStar
- VISTA
- PreQuest

* SuperStar, 用于预测分子间的相互作用, 可作为附加选项-详情请见另页介绍。

** Mercury 中的 *Materials* 模块是CSD系统中附加的一个组份。其详情请见另页介绍。对于在科研教学机构中已经使用CSD系统的用户, *Materials*模块可被免费使用。来自商业组织的用户可通过联系 materialsmercury@ccdc.cam.ac.uk 获取与使用这一模块相关的信息。

剑桥结构数据库系统 [The Cambridge Structural Database]

全世界的小分子晶体结构数据库

剑桥结构数据库

剑桥结构数据库[1] 含有将近五十万个有机和金属有机化合物的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。

本数据库中所有的分子结构都经过了广泛，仔细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。本数据库一直在根据新发表和新存入的数据不断更新（年增长率约 9%），同时也在不断完善已有的数据记录。本数据库每年发布一次。定期更新可通过互联网下载。

剑桥结构数据库中的每项输入都包括以下内容：

- 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链接
- 交叉引用立体异构体及有关重新解释和确认的详情
- 其他已发表的与该分子有关的信息：
 - 化合物来源
 - 结晶条件
 - 绝对构型的确定实验
 - 多晶型现象（同质多象）
 - 生物活性

PreQuest

PreQuest 可方便用户构建自己专用的晶体结构数据库，然后可对该数据库用ConQuest 独立或与CSD相结合进行搜索。在正式把一个晶体数据编入CSD数据库前，剑桥晶体结构数据中心（Cambridge Crystallographic Data Centre, CCDC）的编辑们用PreQuest来检查验证每一个要存入数据库的晶体结构。PreQuest 的性能包括：

- 认可一系列的数据输入格式 (CIF, SHELX, MOL, MOL2和CCDC的BCCAB格式)
- 简便的对文字和数字的修饰功能
- 可根据三维晶体结构自动显示二维化学结构图
- 二维化学结构图编辑功能
- 显示，验证和编辑三维结构数据
- 可将已验证的数据以CSD 格式输出以建立用户自己专用的数据库

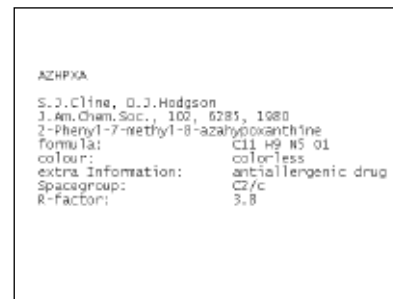


图1：修饰编辑文字与数字信息

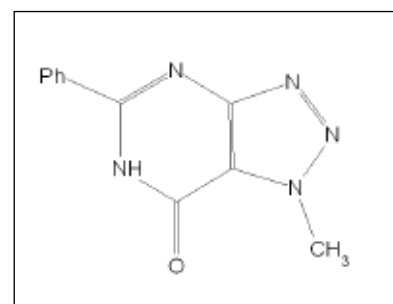


图2：二维化学结构图

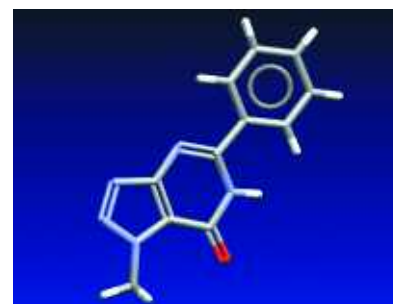


图3：三维分子结构图

数据的搜寻与提取 [Search & Retrieval]

文字，亚结构与几何结构查询

ConQuest

ConQuest [2] 是用于从剑桥结构数据库搜索和提取结构信息的基础软件。该软件提供在剑桥结构数据库中全方位的文字与数字查询，同时还具有更高级的搜索功能：

- 化学亚结构的搜索
- 几何结构的搜索
- 分子间和分子内相互关系的搜索

对于所查询的每个三维化学亚结构，ConQuest 可帮助用户定义，提取和输出与之对应的一系列几何参数，并直接与Mercury相链接以显示选中的结构，或者与Vista 链接以分析和显示所提取的几何数据。ConQuest 功能包括：

- 全方位的文字与数字搜索选择，包括文献与实验细节
- 含有能直接输入命令的界面以实现批量查询的功能
- 与电子版文献资源直接链接
- 化合物名称，化学式，和元素组成的搜索
- 二维化学亚结构画图功能，可界定一系列的成键约束条件（图四）
- 可直接从ChemDraw 和ISIS/Draw 剪贴二维结构图
- 三维几何搜索以确定药效团模型，其分子内氢键和特定的构象
- 三维搜索分子间非共价键接触，如：氢键，偶极相互作用
- 提取二维和三维化学亚结构的几何数据
- 提供简便的机制用于合并不同的查询方式使其升级为更高级的查询
- 对选中的化合物列表进行管理，可合并及注释搜索结果
- 提供多种文件输出格式（包括CIF, PDB, MOL2, SHELX, PDF, MOL）
- 完善的产品介绍文件，使用指南及对相关内容的引导

ConQuest 在教学中的使用

Classroom ConQuest 是为帮助群体教学活动所设计的。任何ConQuest 的用户均可根据需要无限量安装Classroom ConQuest 软件。

Classroom ConQuest 拥有ConQuest的所有功能，可被用于搜寻CSD 的一个子集（可与Classroom ConQuest 一起提供）或用于搜寻用户自己通过CSD建立的子数据库。



图4：ConQuest 的画图窗口，用于构建二维化学亚结构并界定几何参数



图5：结果显示界面，用于快速扫描所得结果，目标亚结构显示为红色

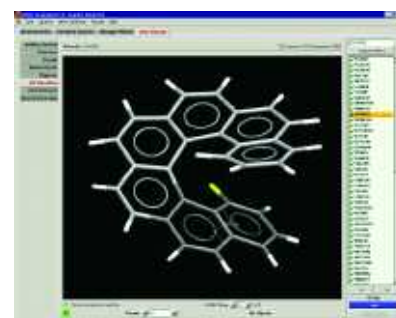


图6：ConQuest 的分子显示功能提供一系列的显示形式，包括显示晶胞的堆积

图像显示与分析 [Visualisation & Analysis]

晶体结构开发与数据显示

Mercury

Mercury [6] 提供了一整套丰富的软件工具用于显示及比较晶体与分子结构，从而探索分子网络与晶胞堆积。Mercury 的性能包括：

- 多种结构显示选择和图像操作功能，包括各项异性热参数的椭球位移模型（图7）
- 计算及显示几何参数
- 定位及显示氢键及其他短距离相互作用（图8）
- 基于分子间相互联系的网络扩展与探索
- 具有创建与显示几何中心，最小二乘法均面以及密勒晶面的功能
- 显示晶胞参数，并可向任意方向扩展晶胞数，及晶体中任意方向的切面内容
- 模拟并输出多晶（粉末）衍射图像
- 2007及更高版本可与MOPAC兼容，提供以分子为基础的气相计算
- 具有多种保存和输出格式的选项，可直接输出至POV-Ray
- 可同时显示多个结构，并对这些结构应用最小二乘法进行叠加比较
- 可编辑晶体结构，包括‘一键’设定键型及添加缺失的氢原子
- 在硬件条件允许的情况下，可显示立体视图
- 显示空间群对称元素（图九）
- 直接链接到分子间及分子内的几何结构数据库（Mogul和Isostar）

一个新投入使用的功能模块Materials 模块[7] 为您提供如下操作提供了方便：

- 比较及量化结构间晶胞堆积的相似性
- 识别结构中相似的区域
- 在一系列的结构中搜寻特定形式的相互作用，或者综合的晶胞堆积特性，并对它们的几何特征进行比较

VISTA

VISTA是一个互动的分析与统计软件，可阅读用户自定义的几何数据和其它通过ConQuest从CSD中 提取的数字信息。VISTA的性能包括：

- 以电子数据表格的形式显示所提取的参数
- 简便地用笛卡尔坐标(Cartesian)或极性轴构建参数分布的柱状或散点图
- 参数分布的简要统计学描述
- 图表与CSD中搜寻结果之间的超级链接
- 对现存参数进行数学组合处理以产生新的参数
- 数理统计分析功能包括线性回归与主体组分分析
- 制备用于发表文章和报告的图表

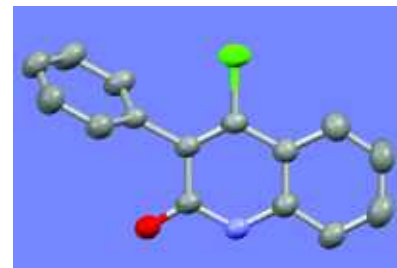


图7：用MercuryCSD显示的各项异性热参数的椭球位移模型

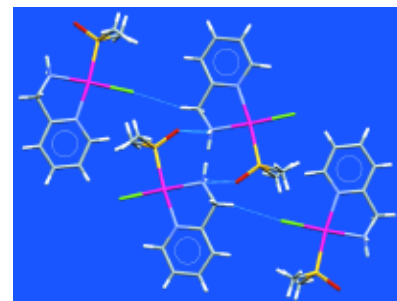


图8：局部晶胞堆积图，显示氢键及短距离相互作用

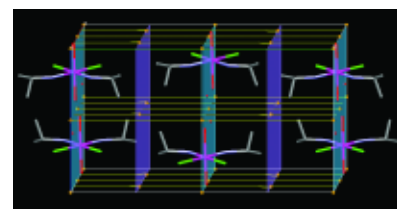


图9：空间群对称元素图，橙色球体为反转中心，黄色直线为旋转轴，蓝色及紫色的面分别为镜面及像移面。

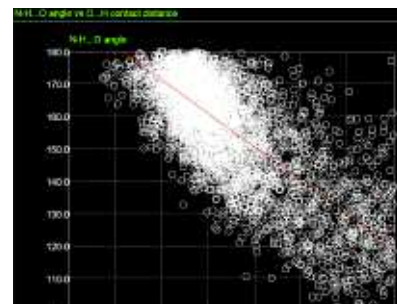


图10：邻近(C=O...H-N) 的距离相对于其N-H...O角度的散点图。最短的氢键可被发现集中于CO...NH角度趋于线性的区域。

获取知识的源泉 [Knowledge Bases]

分子几何结构与非键相互作用

Mogul

只需点击一下，Mogul [8] 即可迅速从CSD中几百万个各类化学键长，键角和非环扭转角数据中提取信息以便快捷地显示分子的几何结构。应用范围包括验证新的晶体结构，发现非同寻常的几何特性，查证通过计算而得到的构象（如过滤筛选蛋白质-配体嵌合模拟的结果以便去除不可能的配体构象），及建立配体库用于蛋白质晶体结构的精调。

Mogul的性能包括：

- 认可各种文件输入格式(MOL2, CIF, RES, MOL, PDB), 并可构建二维分子图
- 快捷的几何性能选择及自动构建搜索目标亚结构 (图11)
- 随时快速提取几何数据信息， 将所得结果以柱形图形式显示，同时给出详细的统计学描述 (图12)
- 直接察看柱形图中的CSD分子结构
- 根据实验精度 (R-因子) 筛选过滤所得结果
- 片段构建，从CSD中含有紧密相关片段的结构中添加数据
- 只需点击一下即可获得关于某一分子的所有化学键长，键角，及非环扭转角的数据
- 通过指示文件界面整合客户端应用

Mogul已经成功进行了与CRYSTALS [9] (用于单晶X射线结构精调) 和DASH[10] (用于从粉末衍射的数据进行晶体结构解析) 的整合。

IsoStar

IsoStar [11]可提供对收集在CSD和PDB实验数据库[12]中的非键相互作用的几何参数信息的快速访问。对于一个中央基团(A)和一个接触基团(B)之间的相互作用，IsoStar可通过叠加基团A的单体，以三维散点分布图的形式显示出B在A周围的分布 (图13)。通过3D散点图可以查看收集在CSD中超过2万2千多种，和在PDB中大约7千4百多种化学功能基团对。散点图的等值线可表征结合热点，及任意指定的某种接触出现的可能性。IsoStar的性能包括：

- 具有用于选取化学功能基团的网页浏览器界面
- 可以选择基于CSD或PDB构建的散点分布图
- 1550 种最低势能计算值[13]
- 定义接触距离的显示限度
- 允许用户自行定义散点图密集度
- 提供散点图中各个点与CSD或PDB中相关结构的超级链接
- 提供特定接触的几何参数的报告

用户自定义的功能基团组合散点图如不被IsoStar所涵盖，可使用IsoGen (和IsoStar一起提供) 构建。

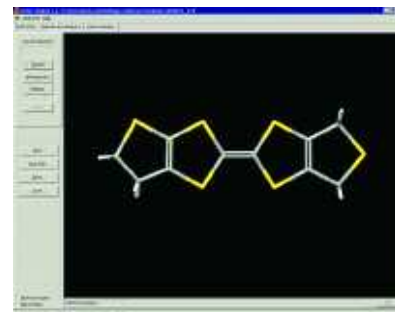


图11: 可以在Mogul界面构建或输入目标分子的三维结构图。通过选择特定的原子可以得到相关的键长，键角或非环扭转角参数。

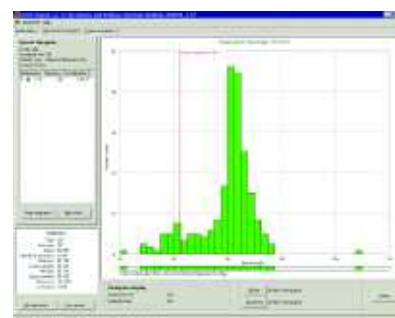


图12: 用图11中的搜索结果构建的柱形图，同时显示统计数据。

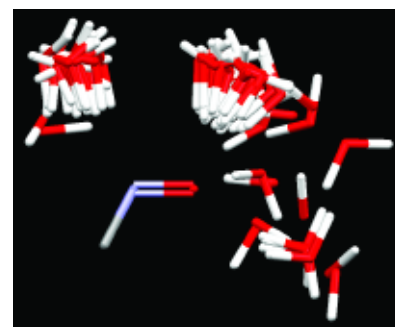
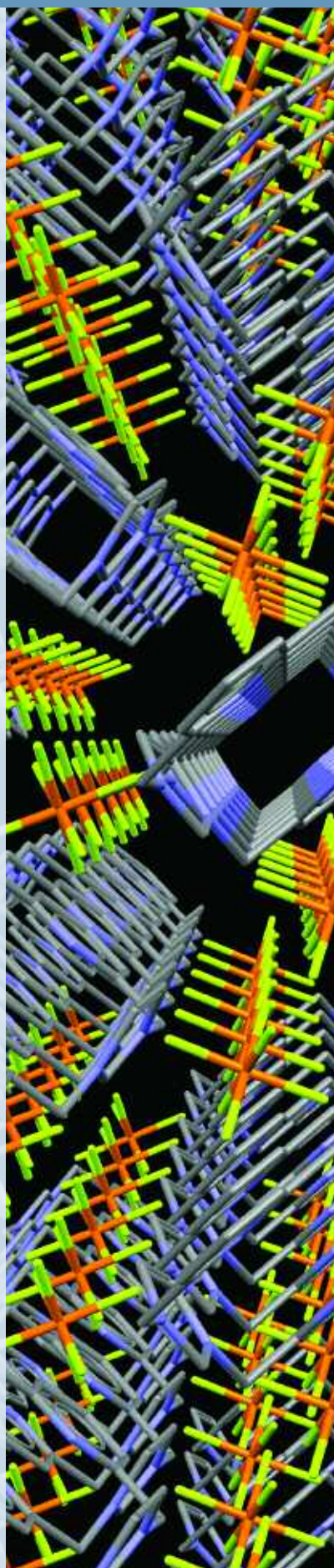


图13: CSD散点图: 显示一组OH在一个亚硝基周围的分布

剑桥结构数据库系统 [The Cambridge Structural Database System]

对实验晶体结构的了解和探索



剑桥结构数据库 (CSDS) 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寻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。

剑桥数据库系统的应用范围:

- 搜寻与图像显示晶体结构
- 分析分子参数
- 研究构像取向
- 探索药效团模型
- 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**

剑桥数据库系统由以下六部分组成:

- ConQuest
- Mercury
- Mogul
- IsoStar
- VISTA
- PreQuest

* SuperStar, 用于预测分子间的相互作用, 可作为附加选项-详情请见另页介绍。

** Mercury 中的 *Materials* 模块是CSD系统中附加的一个组份。其详情请见另页介绍。对于在科研教学机构中已经使用CSD系统的用户, *Materials*模块可被免费使用。来自商业组织的用户可通过联系 materialsmercury@ccdc.cam.ac.uk 获取与使用这一模块相关的信息。