

Уважаемые коллеги!

В БЕН РАН до конца 2020 года в рамках национальной подписки открыт доступ к базе данных CSD Enterprise (электронный ресурс Кембриджского центра структурных данных).

Доступны следующие сервисы:

1) Web SCD: онлайн-порталы WebCSD и Relibase+ (база данных кристаллических структур макромолекул) с возможностями сравнительного анализа, записи и хранения отдельных частей.

2) CSD System: Cambridge Structural Database

- ConQuest (поиск структурных данных в CSD, позволяющий сохранение записей базы данных);

- IsoStar (библиотека параметров межмолекулярных взаимодействий);

- Mercury (программы для визуализации и анализа структурных данных);

- Mogul (программы для валидации геометрии структур молекул).

3) CSD Enterprise:

- DASH (программа для анализа данных рентгеновской порошковой дифракции);

- GOLD (программа молекулярного докинга);

- SuperStar (программа для предсказания активных центров макромолекул);

- CrossMiner (интерактивный инструмент для поиска фармакофорных признаков в БД CSD и Protein Bank Database).

Ссылка на ресурс: <https://www.ccdc.cam.ac.uk/structures/>

Подробное описание по ссылке: <https://podpiska.rfbr.ru/main/>