

Возможности электронных ресурсов Кембриджского центра структурных данных



Докладчик: Анна Владимировна Вологжанина, к.х.н., с.н.с.
ИНЭОС РАН, представитель CCDC в России

Приглашаем Вас 11 апреля 2018 г. в 11:00 в аудиторию 322 на обзорную лекцию о возможностях использования ПО Кембриджского центра структурных данных (CCDC) в учебной и научной работе. Будут рассмотрены модули, составляющие комплекс программ **CSD-Enterprise**, и приведены примеры их использования в химии, биохимии и материаловедении.



- Он-лайн и офф-лайн сервисы CCDC
- Базы данных о кристаллическом строении малых молекул (**CSD**) и комплексов белков с малыми молекулами (**Relibase+**)
- Поиск соединений по текстовым, 2D и 3D структурным фрагментам

CSD-System: Анализ больших массивов данных

- Изображение, анализ и 3D печать молекулярных и кристаллических структур
- Изучение внутри- и межмолекулярных взаимодействий
- Возможность оптимизации процедур поиска и анализа



CSD-Materials: Анализ и поиск функциональных материалов

- Оптимизация кристаллической формы
- Поиск новых кристаллических форм
- Определение кристаллической структуры по данным порошковой рентгеновской дифракции.

CSD-Discovery: Анализ и поиск функциональных молекул

- Анализ комплексов белков с малыми молекулами
- Молекулярный докинг малых молекул в белках
- Определение активных центров в малых молекулах и поиск их стерических и электронных аналогов

