

Strukturní databáze v chemii

Jak získat, vyhodnotit a využít
informace o molekulové a
krystalové struktuře látek

RTG strukturní analýza

krystaly + RTG záření



difrakční obraz

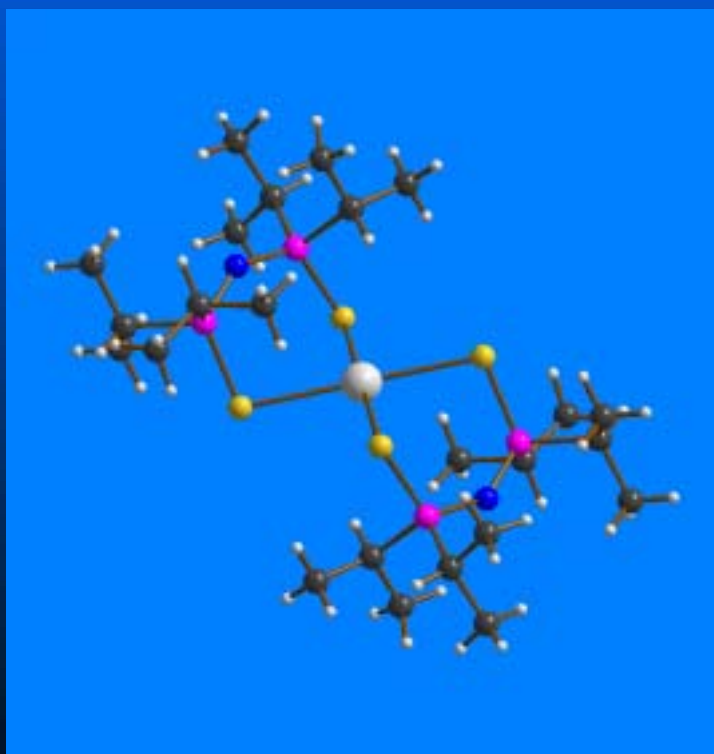
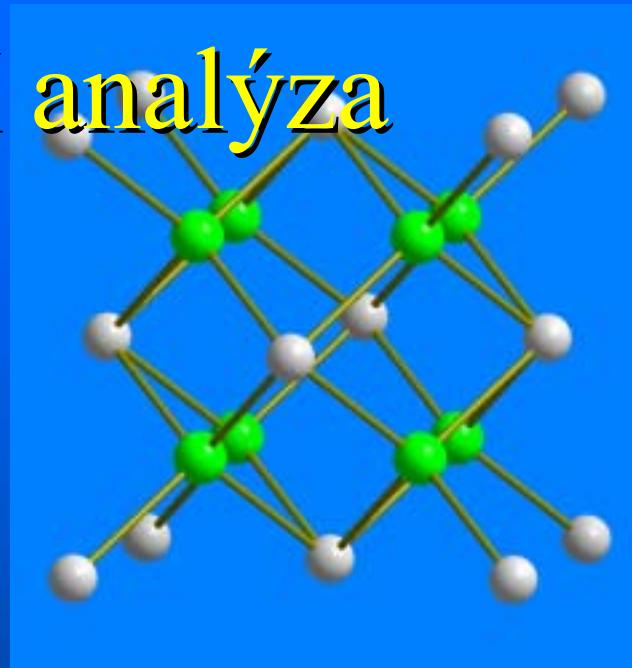


mapa elektronové hustoty

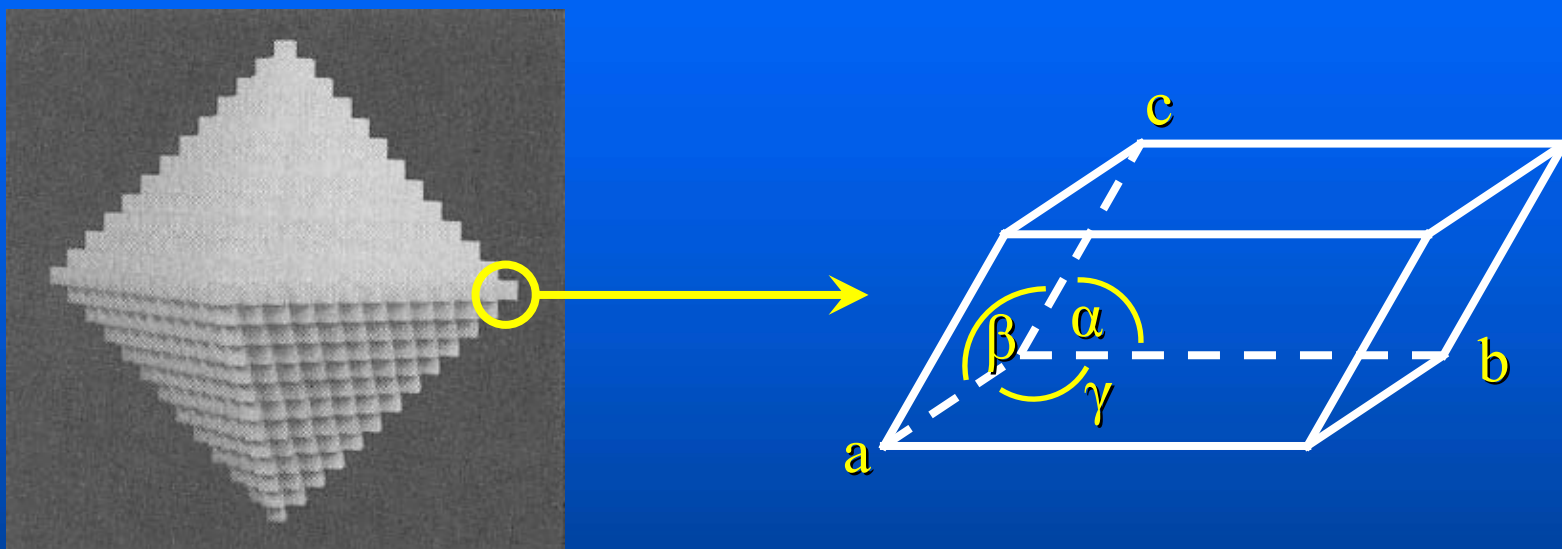


atomové pozice, vazebné délky, úhly...

RTG strukturní analýza



Strukturní údaje z RTG analýzy



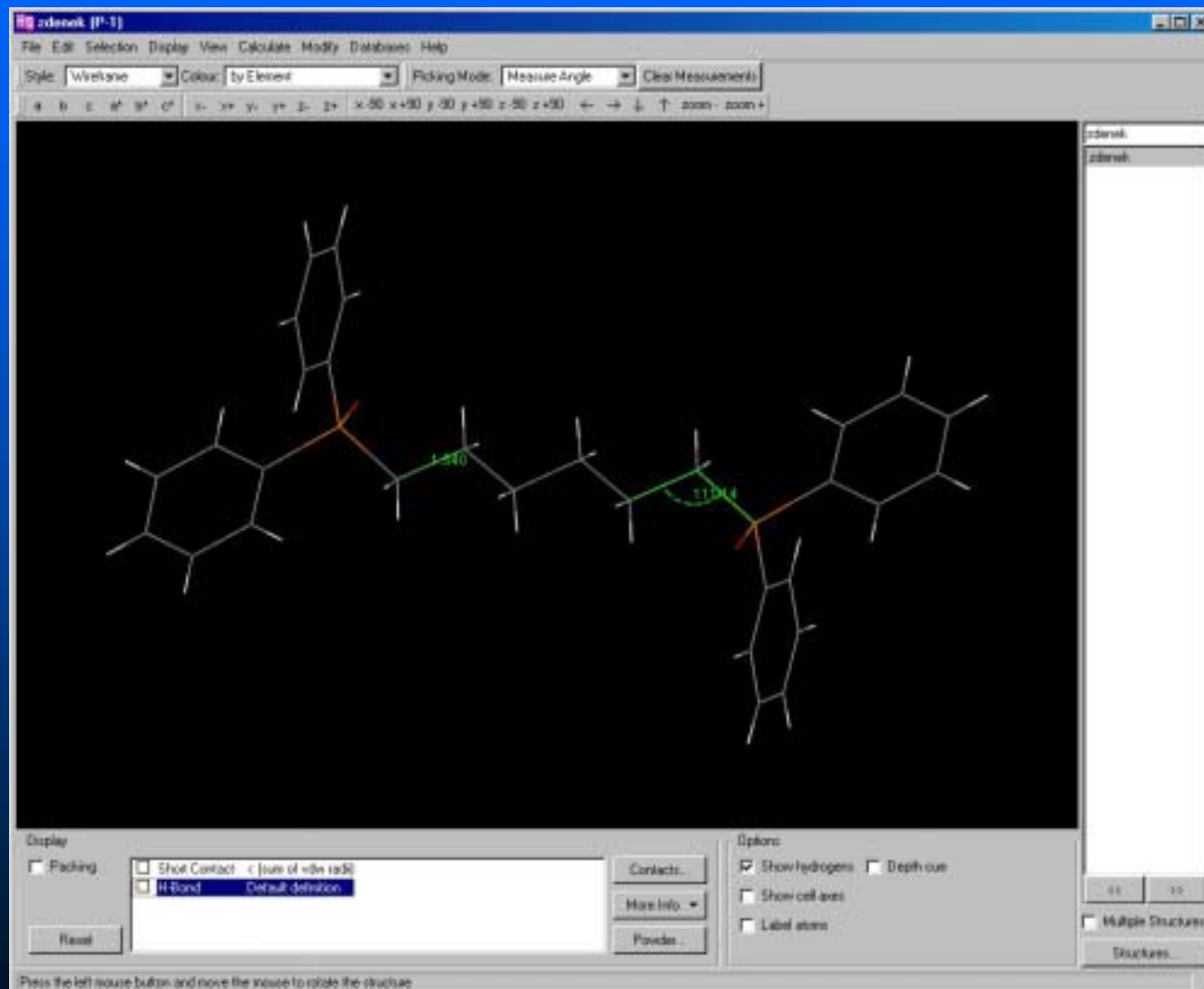
- parametry základní buňky = **mřížkové parametry**
 $a, b, c, \alpha, \beta, \gamma$
- souřadnice atomů v základní buňce

CIF ...

■ Crystallographic Information File

_cell_length_a	5.842(4)
_cell_length_b	8.865(5)
_cell_length_c	13.281(6)
_cell_angle_alpha	83.54(4)
_cell_angle_beta	79.09(4)
_cell_angle_gamma	75.64(5)
_cell_volume	652.7(6)
_refine_ls_R_factor_all	0.0570
_refine_ls_R_factor_gt	0.0419
_refine_ls_wR_factor_ref	0.1090
_refine_ls_wR_factor_gt	0.1009

... a Mercury



Uchování údajů

- Strukturní databáze

CSD – Cambridge Structural Database

ICSD – Inorganic Crystal Structure Database

PDB – Protein Data Bank

NDB – Nucleic Acid Database

Přínos databází

- porovnáním charakteristických údajů možno identifikovat známou strukturu
- srovnávací účely, statistiky
- vyhledávání známých struktur (rešerše)

CSD (www.ccdc.cam.ac.uk)

■ 400.977 sloučenin (01/2007)

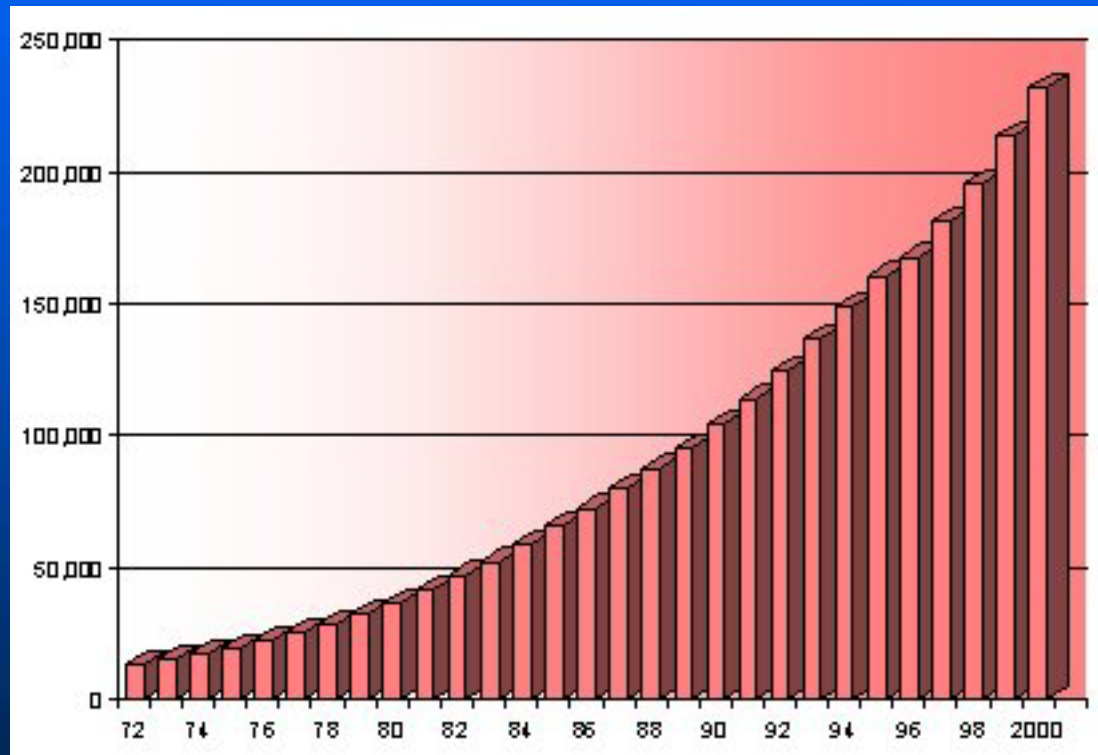
Odlišné sloučeniny	363.931	
Organické struktury	172.583	43.0 %
Obsahující d-kovy	210.700	52.5 %
Obsahující s-kovy	21.219	5.3 %
Obsahující p-kovy	25.790	6.4 %

■ přírůstek cca 30.000 sloučenin ročně

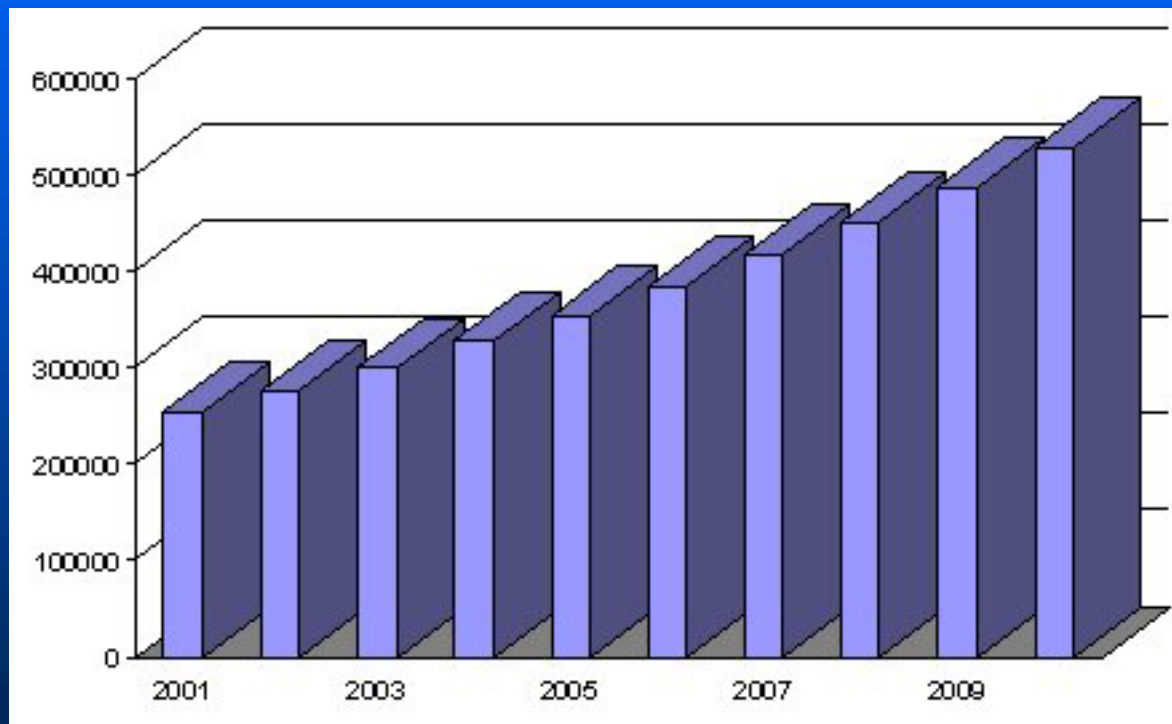
Distribuce CSD

- distribuce na CD-ROM, 1x ročně
- licence pro kalendářní rok
- aktualizace prostřednictvím WWW

Růst CSD v letech 1972 – 2000



Předpokládaný růst CSD



CSD v ČR

- grant GAČR 203/02/0436

**Aplikace krystalografických databází ve
vědecké praxi**

Krystalografická společnost

Ing. Jan Ondráček, CSc.

CSD

- instalace na MU



klientské počítače vybavené X-Serverem

Informace v CSD

- 1D informace

 - bibliografické informace

 - základní krystalografické údaje

- 2D informace

 - chemický vzorec

- 3D informace

 - atomové souřadnice

1D Bibliographic Information

BASYOJ

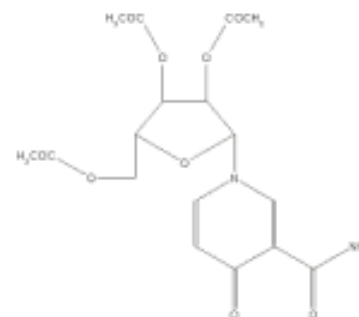
4-Oxonicotinamide-1-
(1'-beta-D-2',3',5'-tri-O-
acetyl-ribofuranoside)

Source: Rothmannia longiflora
C17 H20 N2 O9

G. Bringmann, M. Ochse, K. Wolf,
J. Kraus, K. Peters, E-M. Peters,
M. Herderich, L. Ake, F. Tayman

Phytochemistry 51 (1999), p271

2D Chemical Connectivity

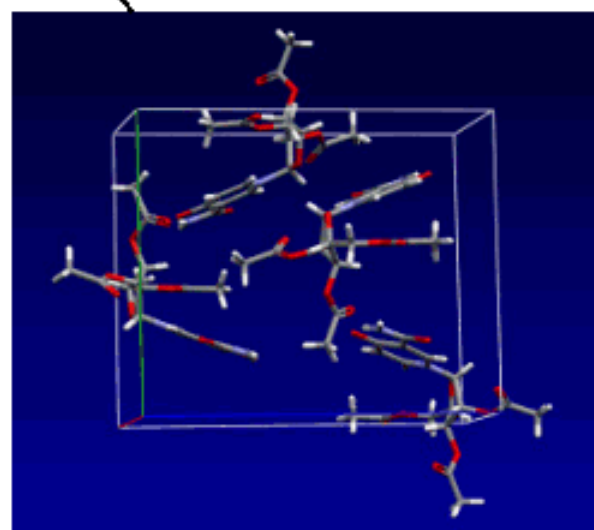


CSD

3D Molecular Structure



3D Crystal Structure



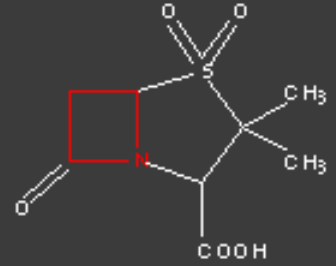
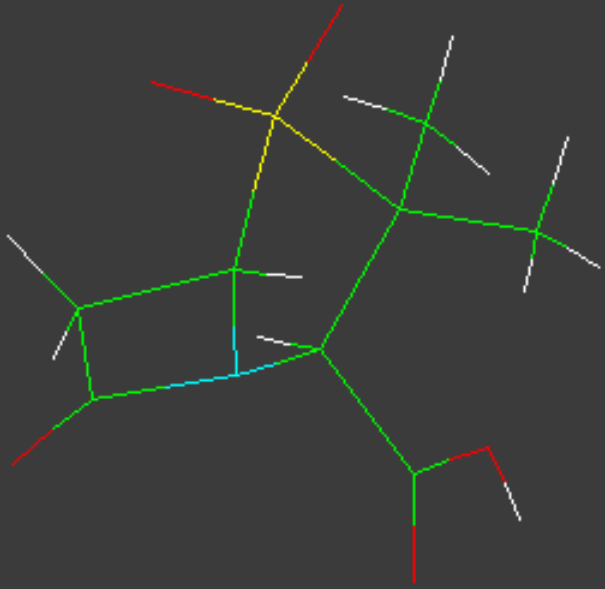
CSD systém

- vlastní databáze
- ConQuest – moderní rozhraní
- QUEST – starší rozhraní
- VISTA – statistická analýza
- Mercury – zobrazování struktur

CSD - QUEST

© © © © Refcode: BAFVOT Hits: 0 D/B: 3679 To 1D To 2D To 3D


||||| H
||||| W
||||| Z
||||| D
||||| O
||||| O



FAST
DIAG
NODIAG
OPTIONS
MORE
COORD
LABEL
ALL
NONE
NONH
LIST
RENDER
RESET
REFRESH
HYDR

CONTROL
KEEP REJECT HELP
EXIT QUIT
USE-AS-QUERY

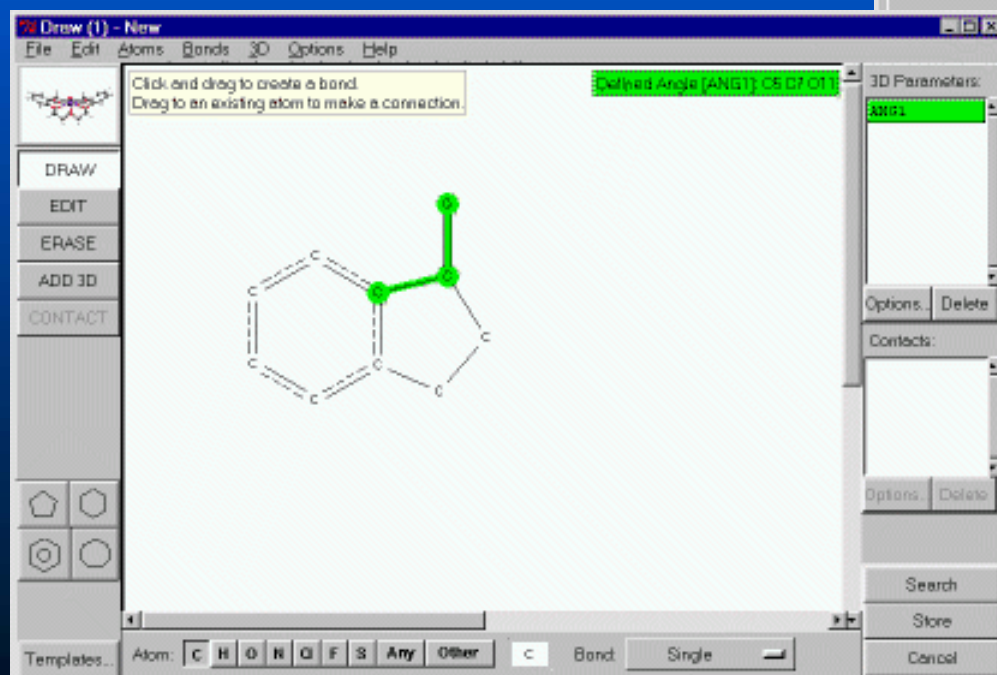
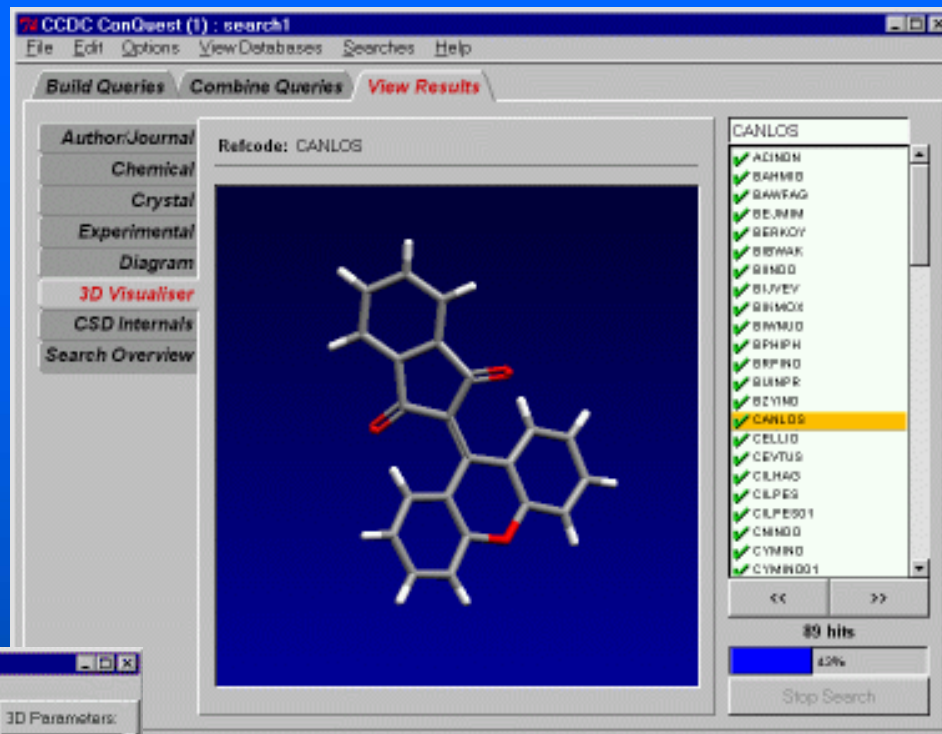
2.00



--> TORS

Calculate the TORSION angle, in degrees, between four atoms, centroids and/or dummies.

CSD



ConQuest

Vyhledávání v CSD

- dle strukturního fragmentu
- dle textových informací
- možnost logických spojení dotazů (AND, OR, NOT)
- 2D-,3D-constraints
max. koordinační číslo, cyklicita, geometrie
v okolí fragmentu

Vkládání dat do CSD

- Vlastní data lze do CSD vložit e-mailem *deposit@ccdc.cam.ac.uk*
- Většina časopisů vyžaduje před zasláním rukopisu i vložení RTG struktur do CSD, případně ICSD

Top 10 časopisů v CSD (01/2007)

	Počet	Časopis
1.	33482	<i>Inorg. Chem.</i>
2.	22590	<i>Organometallics</i>
3.	24508	<i>J. Am. Chem. Soc.</i>
4.	22897	<i>J. Chem. Soc., Dalton Trans. + Dalton Trans.</i>
5.	21311	<i>Acta Crystallogr., Sect. C</i>
6.	18348	<i>J. Organomet. Chem.</i>
7.	13897	<i>Inorg. Chim. Acta</i>
8.	13451	<i>Chem. Commun.</i>
9.	12471	<i>Acta Crystallogr., Sect. B</i>
10.	10619	<i>Acta Crystallogr., Sect. E</i>
11.	10400	<i>J. Org. Chem.</i>

ICSD (www.fiz-karlsruhe.de)

- strukturní údaje o 100.243 anorganických sloučeninách (02/2007) od r. 1913 do souč.
- aktualizace na CD-ROM 2x ročně
- existuje i předplacená WWW verze

ICSD FindIt

FindIt
File View Options Window Help

Search ICSD

Chemistry Crystal Data Reduced Cell Symmetry Reference

H	D	T
Li	Be	
Na	Mg	
K	Ca	Sc
Rb	Sr	Y
Cs	Ba	
Fr	Ra	

MET	TRM	NOM
TRU	ALE	CHA

									He
	B	C	N	O	F				Ne
	Al	Si	P	S	Cl				Ar
	Ga	Ge	As	Se	Br				Kr
	In	Sn	Sb	Te	I				Xe
	Tl	Pb	Bi	Po	At				Rn

And And Not
 Or Or Not

AND Element Count
 to

Element Subscript
 to i

Oxidation State
 to

<< Periodic Table

Type
 Normal
 Exclusive AND
 Exclusive OR

Selected Elements: (Boolean operators are in the upper right. Right click on groups to see contents.)

Search Screens Visual 13.12.2006 17:32

ICSD FindIt

FindIt
File View Options Window Help

Search ICSD

Chemistry **Crystal Data** Reduced Cell Symmetry Reference

Author's Cell

Low High \angle Low High \angle Low High \angle Type of Cell
a \angle b \angle c \angle Author
 α $^\circ$ β $^\circ$ γ $^\circ$ Reduced
V Vol Input Ranges 0.1 \angle edges 1.0 $^\circ$ angles 5.0 % Vol
 Use Tolerances

Space Group Number **i** **i** Year of Publication

Z Density (calculated)

R-Value Formula Weight

ANX Formula **i**

Minimum Distance

i Atom 1 bonded to Atom 2 **i** Range Use Defaults

Reset Clear Page (Chemistry Selection) Search

Search Screens Visual 13.12.2006 17:34

ICSD FindIt

FindIt
File View Options Applications Window Help

ICSD 2
Items: 1 - 14 Num Checked: 3
Page #: 1 Change page
Total Hits: 14
Search Query: (((H AND O AND P)) AND (EC[3]))

CCode	Year	Space Group	Z	Sum Formula	Unit Cell	Reduced Cell
<input checked="" type="checkbox"/> 2096	1974	P121/A1	8	H4 O4.5 P1	7.92 12.99 7.47 90 109.9 90 722.63	7.47 7.92 12.99 90 90 109.9 722.63
<input type="checkbox"/> 9130	1971	PCCN	4	H8 O8 P2	6.557 11.634 9.464 90 90 90 721.95	6.557 9.464 11.634 89.999 89.999 9...
<input type="checkbox"/> 15103	1969	P121/C1	8	H4 O4.5 P1	7.387 12.915 7.85 90 109.8 90 704.64	7.387 7.85 12.915 89.999 89.999 10...

Title A refinement of the crystal structure of H3 P O4 (H2 O)0.5
 Author(s) Dickens, B.;Prince, E.;Schroeder, L.W.;Jordan, T.H.
 Reference Acta Crystallographica B (24,1968-38,1982)
 (1974), 30, 1470-1473
 Unit Cell 7.92(1) 12.99(2) 7.47(1) 90. 109.9(1) 90.
 Vol 722.63
 Z 8
 Space Group P 1 21/a 1
 SG Number 14
 Cryst Sys monoclinic
 Pearson mP76
 Wyckoff ell
 R Value 0.027
 Red Cell P 7.47 7.92 12.99 90 90 109.9 722.63
 Trans Red 0.000 0.000 1.000 / 1.000 0.000 0.000 / 0.000 1.000 0.000
 Comments New refinement based on previously measured intensities

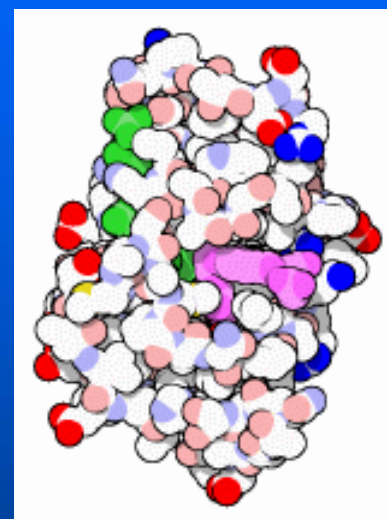
Atom #	OX	SITE	x	y	z	SOF	H
P 1	+5	4 e	0.4464(1)	0.39810(8)	0.2521(1)	1.	0
O 1	-2	4 e	0.5940(1)	0.36929(8)	0.4319(1)	1.	0
O 2	-2	4 e	0.4478(2)	0.33689(9)	0.0740(1)	1.	0
O 3	-2	4 e	0.2594(1)	0.38099(8)	0.2680(1)	1.	0
O 4	-2	4 e	0.4589(1)	0.51219(7)	0.1963(1)	1.	0

©2005 by Fachinformationszentrum Karlsruhe, and the U.S. Secretary of Commerce on behalf of the United States. All rights reserved.

ICSD 2 Visual 13.12.2006 17:37

PDB (www.rcsb.org/pdb)

■	30.11.2004	28.508
■	15.11.2005	33.585
■	12.12.2006	40.628
■	27.11.2007	47.509 struktur



- ▣ 43.733 proteiny
- ▣ 1.817 nukleové kyseliny
- ▣ 1.925 komplexy proteinů/nukleových kyselin
- ▣ 34 ostatní