

	CSD-System	CSD-Discovery	CSD-Materials	CSD-Enterprise
<b>Data:</b>				
CSD deposited and curated data	Y	Y	Y	Y
CSD teaching resources	Y	Y	Y	Y
User-proprietary CSD extension	Y	Y	Y	Y
Protein-ligand complexes		Y		Y <sup>1</sup>
User-proprietary proteins		Y		Y <sup>1</sup>
<b>Deposit:</b>				
Guided data deposition	Y	Y	Y	Y
CIF syntax check	Y	Y	Y	Y
Reduced cell check	Y	Y	Y	Y
Data validation	Y	Y	Y	Y
<b>Access:</b>				
Retrieve via DOI and CSD Identifiers	Y	Y	Y	Y
Link from published articles and repositories	Y	Y	Y	Y
<b>Search:</b>				
Chemical formula, cell parameters, 2D/3D substructure, similarity, and more...	Y	Y	Y	Y
Proteins ( <i>Relibase/Relibase+</i> )		Y		Y <sup>1</sup>
<b>Visualize:</b>				
3D display and manipulation	Y	Y	Y	Y
High resolution graphics and movie generation	Y	Y	Y	Y
3D printing file output	Y	Y	Y	Y
Molecule and structure editing	Y	Y	Y	Y
2D diagram generation	Y	Y	Y	Y
PXRD pattern simulation	Y	Y	Y	Y
PXRD pattern comparison			Y	Y
<b>Analyse:</b>				
Plotting and charting	Y	Y	Y	Y
Descriptive statistics	Y	Y	Y	Y
Interactive visualization	Y	Y	Y	Y
Filtering and categorization	Y	Y	Y	Y
Reporting	Y	Y	Y	Y

	CSD-System	CSD-Discovery	CSD-Materials	CSD-Enterprise
<b>Conformations:</b>				
Bond length assessment	Y	Y	Y	Y
Valence angle assessment	Y	Y	Y	Y
Torsion angle assessment	Y	Y	Y	Y
Ring assessment	Y	Y	Y	Y
Conformer generator		Y	Y	Y
Ligand overlay		Y		Y
<b>Interactions:</b>				
Fragment interaction maps ( <i>IsoStar</i> )	Y	Y	Y	Y
Protein interaction maps ( <i>SuperStar</i> )		Y		Y
Full interaction maps		Y	Y	Y
<b>Docking (GOLD):</b>				
Protein-ligand docking		Y		Y
Ensemble studies		Y		Y
Pose prediction analysis		Y		Y
<b>Proteins (Relibase/Relibase+):</b>				
Protein structure retrieval		Y		Y <sup>1</sup>
Proprietary structures		Y		Y <sup>1</sup>
Cavity comparison by structure		Y		Y
Binding site analysis		Y		Y
<b>Solid form studies:</b>				
Packing similarity search			Y	Y
Packing feature search			Y	Y
Packing motif search			Y	Y
Powder pattern solution ( <i>DASH</i> )			Y	Y
Hydrogen bond propensity			Y	Y
Hydrate analysis			Y	Y
Co-crystal design			Y	Y
<b>Platforms</b>				
Desktop interface	Y	Y	Y	Y
Web interface	Y	Y	Y	Y
CSD Python API	Y	Y	Y	Y
<b>CCDC services:</b>				
On-site training	+	+	+	+
Custom script development	+	+	+	+
In-house database building	+	+	+	+
Solid form risk assessment	+	+	+	+
Crystal form prediction	+	+	+	+
Co-crystal design	+	+	+	+
Virtual screening	+	+	+	+
Research consultancy services	+	+	+	+

<sup>1</sup> Free version is available for academic users from [www.ccdc.cam.ac.uk](http://www.ccdc.cam.ac.uk)

+ Service available – contact CCDC for more information

[info@ccdc.cam.ac.uk](mailto:info@ccdc.cam.ac.uk)

[www.ccdc.cam.ac.uk](http://www.ccdc.cam.ac.uk)

UK: +44 1223 336408

US: 1.848.445.4893

Doc no. 104CSDE15



THE CAMBRIDGE  
CRYSTALLOGRAPHIC  
DATA CENTRE