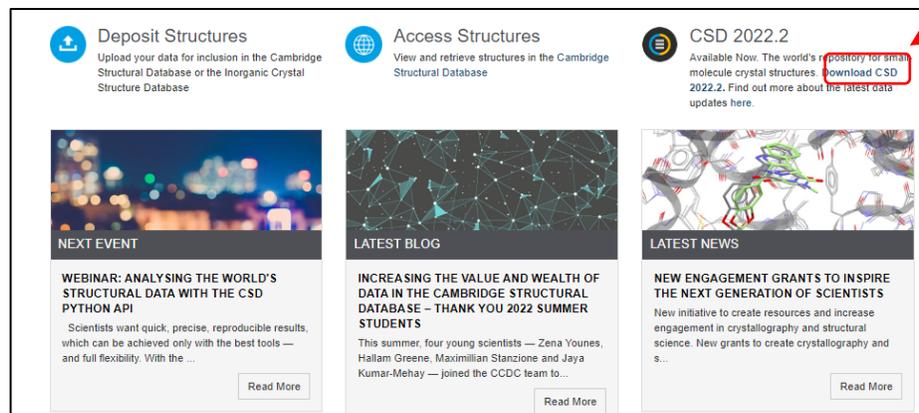


◆CCDC製品：管理者向けメモ◆

★CCDCのwebsiteは、2023年にリニューアルを予定しており、画面等変更になる可能性があります。

【1】CSD利用開始時

CCDCのトップページ (<https://www.ccdc.cam.ac.uk/>)にアクセスし、最新版のCSD Portfolio (CSDパッケージ、ここではCSD2022.2)を入手する。



E-mail, Customer number, Activation keyを入力する。
→ダウンロード用URLがメールで届くので、24時間以内にダウンロードする。
(何度URLを請求してもOK)
ダウンロードしたプログラムを社内で共有してもOK。

- * Customer numberは、サイト毎に決まっている(毎年同じ)。Site番号やCustomer IDと呼ばれることもある。
- * Activation keyは、契約をアップグレード(例：CSD-Core→CSD-Discovery)すると変更になる。

【2】ライセンスの確認など

1. CCDCのトップページ (<https://www.ccdc.cam.ac.uk/>)にアクセスし、Sign Inする。
(未登録の場合、Registerから自分のスペースを登録する)



2. Profile → My licence portal → Customer number, Activation keyを入力すると現在のLicence detailsを確認することができる。ライセンスのOffline登録もこのポータルから実施可能。

★管理者の方は、どのPCにCSDがインストールされているかの把握をお願い申し上げます。
→私物PCへのインストールは認められておりません。(会社管理のPCのみ)

Offline登録する場合は、こちら

Actual activation (registration) records are here

Offline registration is possible here

←何台までactivationできるか

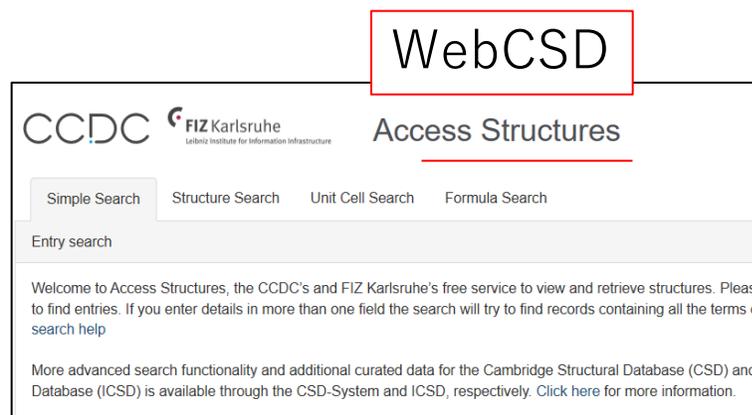
←有効期限

←利用できる機能の一覧

【3】 WebCSDの設定

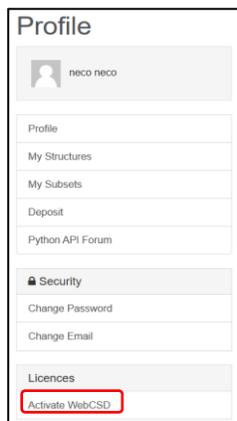
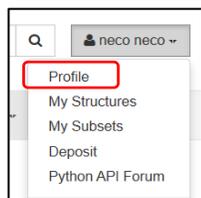
1. IPアドレスを登録し、WebCSDを利用する場合。→ご利用サイトのグローバルIP addressをJAICIまでお知らせください。(WebCSDのご利用は任意)

アクセス先：https://www.ccdc.cam.ac.uk/structures/

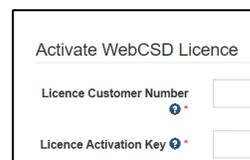


登録が完了すると、Licensed to:が表示されます。
また、Access Structureではなく、WebCSDと表示
されるようになります。

2. WebCSDを社外から利用したい場合。→各自Sign In。この設定は、user毎に実施が必要。(ご利用は任意です)



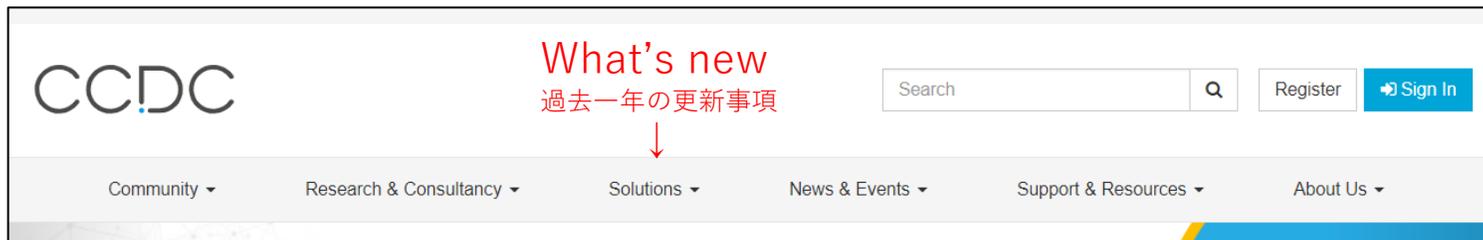
Customer number/ID, Activation keyを入力する。



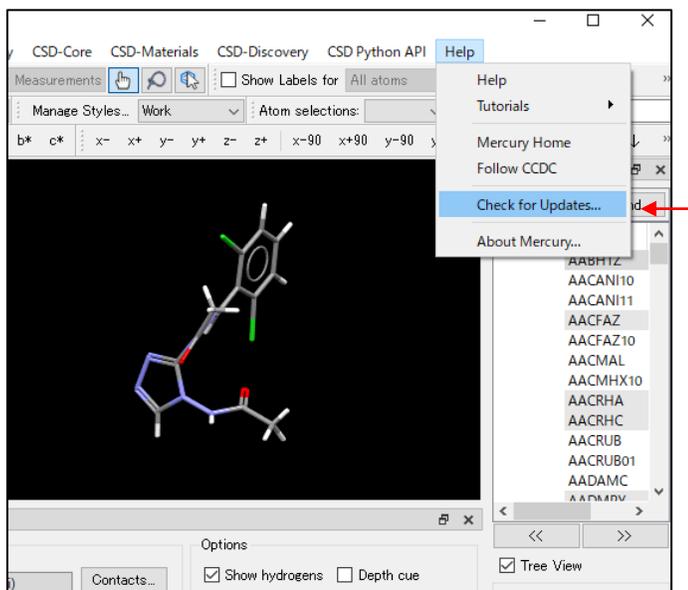
【4】 データ追加、ソフトのアップデート

過去1年の更新事項は、CCDCのトップページ
→Solutions→What's newより確認可能

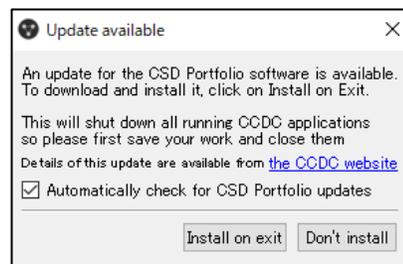
★CSD-CoreはかつてCSD-Systemと呼ばれており、CCDCのwebsiteでは表記が混ざって使用されている場合がございます。ご了承ください。



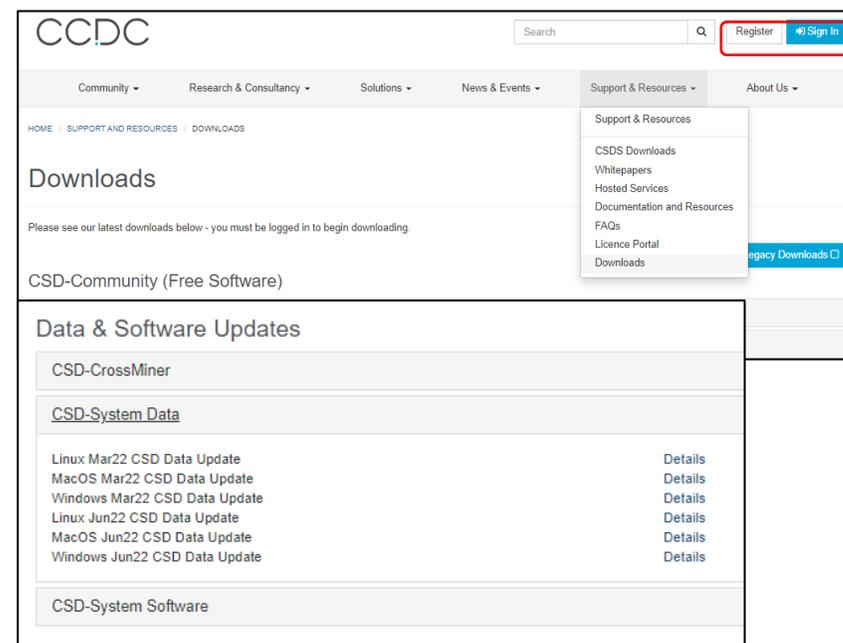
1. Mercuryを起動する→ Help→Check for updates… インタネット経由でupdateがあるか確認し、インストールする。



Automatically check for CSD Portfolio updateに✓マークを入れておくと、Mercuryを起動するたびに、更新がないか自動で確認する。



2. CCDCのwebsiteから手動でダウンロードすることも可能。その際、Sign Inが必要。



【5】よくある質問

1. Access StructuresとWebCSDの違いは？

→ Access Structuresは、CCDCとFIZ Karlsruheが共同運用している結晶構造(CIF)を無料でダウンロードできるサービスです。検索条件やダウンロードできる件数(件数非公開)に制限があります。CSD-Coreに付属するWebCSDは、2D構造式や部分構造検索など、複雑な検索をすることができます。またダウンロード数の制限はございません。

2. ConQuestとWebCSDの違いは？

→WebCSDのデータは、Authorが登録したオリジナルのCIFを収録しています。またWebCSDには、理論計算で求めた結晶構造も含まれています(non-CSD Structuresと表記)。それに対し、ConQuestのデータは、CCDCにてキュレーションを行い(例えば一般名、生理活性、天然物由来、エナンチオマー/ラセミ体、結晶多形の情報など)、付加価値をつけています。また機能の違いとしては、ConQuestではジオメトリーを指定した3D検索が可能という特徴があります。使い分けとしては、データ速報性を重視したい場合はWebCSD、いろいろな条件(キーワード、ジオメトリ、条件のかけ合わせなど)を指定して検索したい場合は、ConQuestのご利用をご利用ください。

3. CSD-Coreを契約し、CSD 2022.1をインストールしました。デスクトップにGOLDやCSD CrossMinerのアイコンがありますが、これらも使えるのでしょうか？

→CSD Portfolio (ここではCSD2022.1)をインストールすると、基本的にCCDC製品のすべてがインストールされます。どのcomponent(機能)が使えるかは、お渡ししたactivation keyにより制御されています。そのため、デスクトップにGOLDやCSD CrossMinerのアイコンがあった場合でも、CSD-Coreに付属したcomponentでないため、起動することはできません。気になるようでしたら、ショートカットを削除していただいても問題ございません(GOLDやCSD CrossMinerを単独でuninstallすることはできません)。

4. データ・プログラムの更新のタイミングは？更新は適用しないといけないでしょうか。

→データは年3~4回、追加されます。プログラムも年3回程度、更新されます。プログラムは、CSD Portfolioに含まれるいずれかのプログラムの更新になるため、必ずしもご利用中の製品の機能が更新されない場合がございます。データの追加やプログラムの更新は任意ですが、Fullインストールが必要な更新については、すべてをアンインストールし、インストールし直すことをお勧めしております。Fullインストールが必要なリリースは、年に1回(or less)程度です。

5. CSD-Coreユーザですが、CSD-Discoveryにアップグレードすることを検討しています。トライアルは、具体的にどのようにするのでしょうか？

→まずは、JAICIにトライアルの申込を行ってください。CCDC側の設定変更後、トライアル用のActivation keyをお送りします。CSD Portfolioをインストール済みのマシンにて、CCDC Software Activationを起動し、お送りしたトライアル用のActivation keyにてライセンス登録してください。

6. CCDC製品を使った研究を論文発表したいのですが、どうしたらよろしいでしょうか。

→ CCDC製品を利用したことの引用並びにpublicationの前に論文のコピーをCCDC(または化学情報協会)までお送りください。

7. 契約を終了する場合、どうしたらよいでしょうか。

→次年度の契約更新案内を契約終了の2,3カ月前にご連絡いたします。ご利用を継続されない場合は、回答期日までにご連絡ください。契約を更新しない場合、お使いのActivation keyの有効期限が切れ、ソフトが起動しなくなります。ダウンロードしたデータは、契約終了後1か月以内に消去が必要です。