



初心者向け

# MogulとIsoStarの概要

1. CCDC製品の構成：アカデミック向けと企業向けの違い
2. WebCSDの紹介と将来計画
3. Mogulと活用例 (Conformer Generator)
4. IsoStarと活用例 (Full Interaction Map/SuperStar)

# 1. CCDC製品の構成

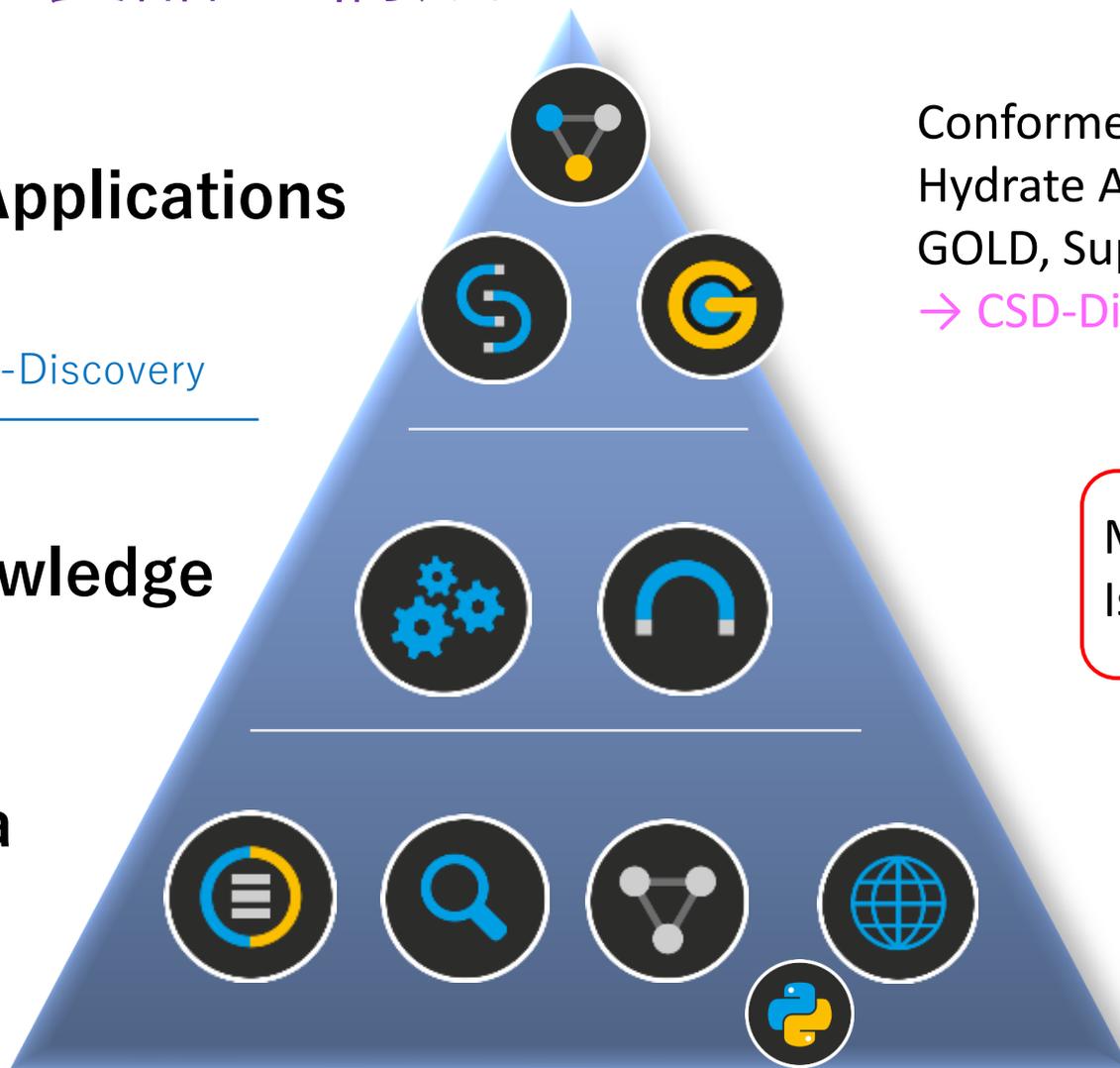
## Applications

CSD-Materials, CSD-Discovery

CSD-Core

## Knowledge

## Data



Conformer Generator, Full Interaction Map,  
Hydrate Analyserなど → CSD-Materials  
GOLD, SuperStar, CSD CrossMinerなど  
→ CSD-Discovery

Mogul : 分子ジオメトリ  
IsoStar : 分子間相互作用

CSDデータと基本ツール  
ConQuest, Mercury, WebCSD  
CSD Python API  
[Deposit Structures, enCIFer]

# 企業・アカデミックの違い

	CSD, WebCSD, ConQuest, Mercury, Mogul, IsoStar, CSD Python API	Full Interaction Maps, Conformer Generator	GOLD, CrossMiner, SuperStar, Ligand Overlay CSD Python API など	Hydrogen Bond Propensity, Hydrate Analyser, 共結晶ツール CSD Python API など	モルホロ ジー表示, Slip面, 表面分析
CSD-Core	★				
CSD-Discovery	★	★	★		
CSD-Materials	★	★		★	
CSD-Particle (追加option)					★
CSD-Enterprise	★	★	★	★	
アカデミック向け CSD-Enterprise	★	★	★	★	★

企業向けには  
目的別の  
パッケージ契約

アカデミックは  
ここに記載のすべて→

★ここに記載しているツールの他に、企業ユーザーのみに提供しているツールあり。

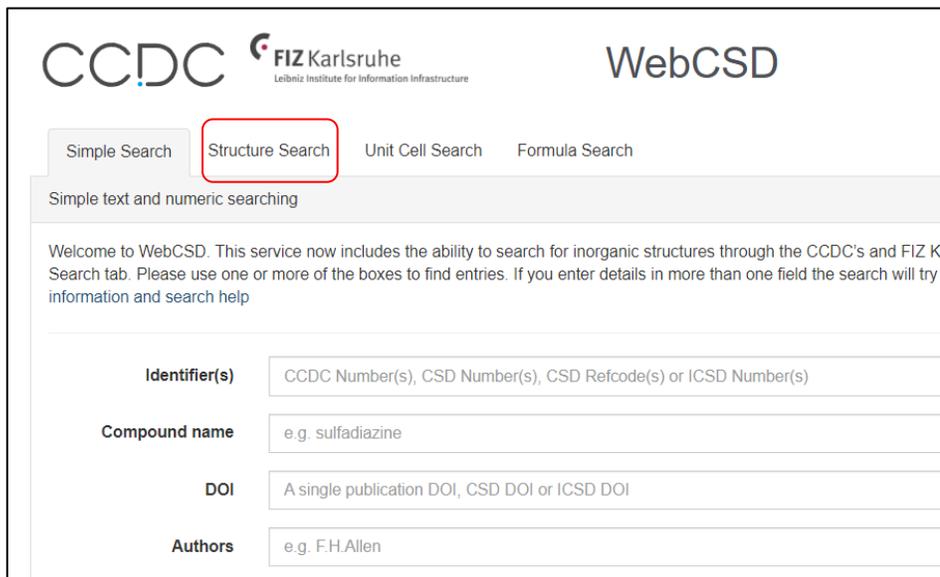
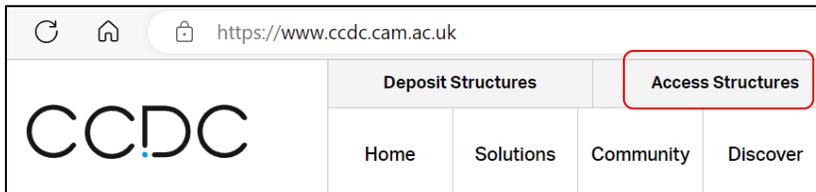
## 2. WebCSDの紹介と将来計画



# WebCSDとは

CCDCのwebsite

Access Structures(無料)にアクセスし、  
CSDユーザが使用できるwebアプリ



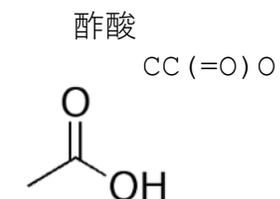
アクセス先:

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

# WebCSDの特徴 (ConQuestとの違い)

1. **速報性に優れ**, 計算で求められた構造(実測でない)も収録 (non-CSD Structures)。CCDCにdepositされたデータそのもの(アノテーションしてない)。
2. **インストール不要!**
3. SMILES/SMARTSでの検索可
4. Similarity searchが可能
5. 3D検索は追加されたが **統計機能なし**(Excel等が必要)
6. **フィルター、かけ合わせ検索不可**
7. In-houseデータの追加不可

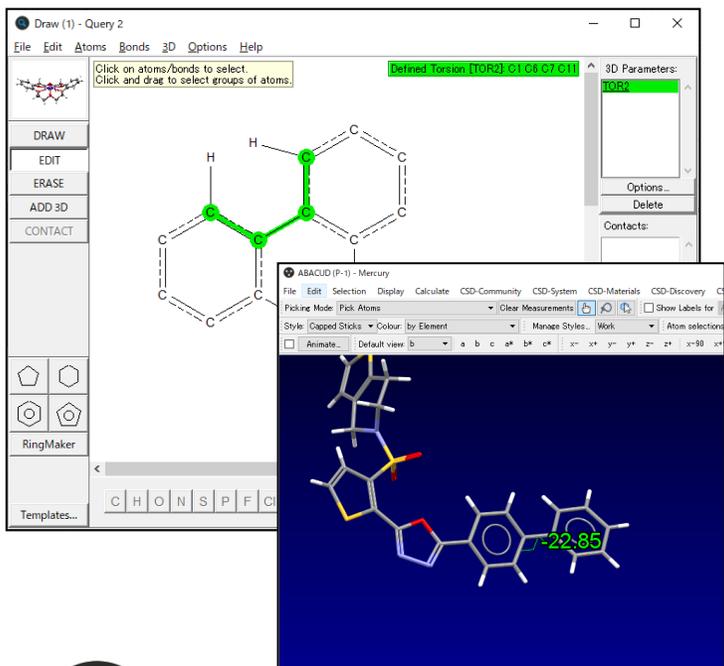
SMILESの例：  
シクロヘキサン  
C1CCCCC1



利用シーンとしては、  
「簡易的に」ある骨格を持つ化合物の結晶構造が登録されているか確認したい。

# CSDのデータへのアクセス方法

Desktopアプリ



ConQuest, Mercury

Webアプリ



WebCSD

プログラム用

```
CSD Python API - Example

In [10]: from ccdc import io, diagram

In [26]: import IPython.core.display
import StringIO

In [27]: # Set up CSD entry reader and find the first entry in the database
import sys

from ccdc import conformer
from ccdc import io

args = parser.parse_args()

mol_reader = io.MoleculeReader(args.inmolfn)
engine = conformer.GeometryAnalyser()

molecules = []
min_unusual_torsions = sys.maxint
for (idx, molecule) in enumerate(mol_reader):
    molecule.standardise_aromatic_bonds()
    molecule.standardise_delocalised_bonds()

    # Do the analysis
    geometry_analysed_molecule = engine.analyse_molecule(molecule)

    # Count number of unusual torsions
    molecule.unusual_torsions = [
        t for t in geometry_analysed_molecule.analysed_torsions
        if t.unusual and t.enough_hits]
    num_unusual_torsions = len(molecule.unusual_torsions)
    molecule.num_unusual_torsions = num_unusual_torsions
    molecules.append(molecule)

if num_unusual_torsions < min_unusual_torsions:
    min_unusual_torsions = num_unusual_torsions
```



CSD Python API

# 将来計画

2025年8月現在

現在CCDCでは、デスクトップアプリ(ConQuest, Mercury, Mogul等)とWebアプリ(WebCSD, IsoStar)等を個々に開発している。

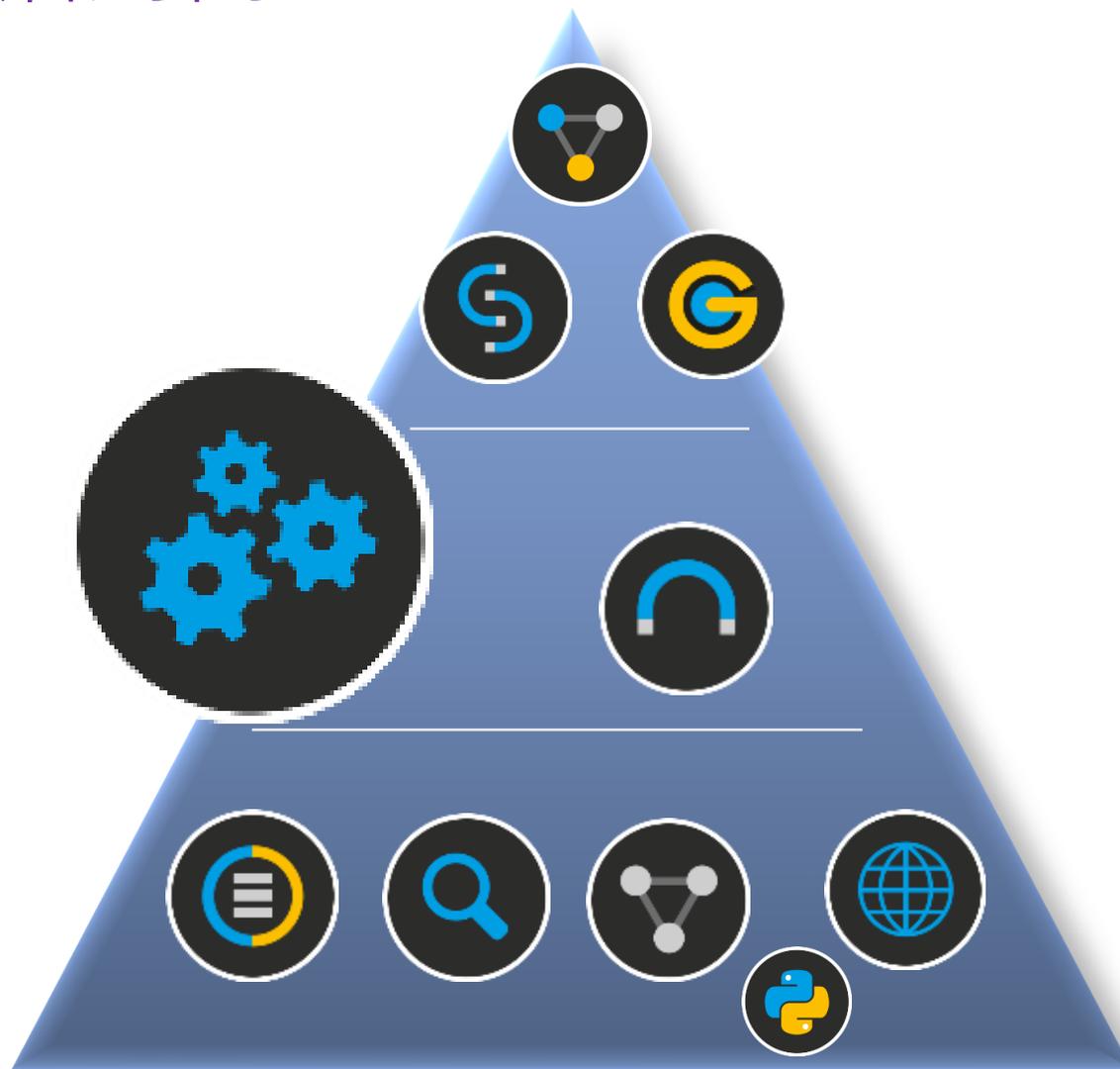
## 【問題点】

- ・データベースフォーマットも異なっており、開発面で効率的でない。
- ・ConQuestインストール時、データ容量が大きくなり、容量が少ないPCにインストールできないケース発生。

## 【現状と計画】

- ・現在、WebCSD (CCDCのサーバ)に集約すべく、機能強化中。→ **ADD3Dが追加された**
- ・企業ユーザからIn-houseデータを追加したいという要望があり、In-houseサーバを利用する **On-Site WebCSD**を提供開始。
- ・ConQuestの機能をWebCSDに移行し、将来的にConQuestの提供を終了。
- ★ 最終目標は、デスクトップアプリをwebアプリに統合すること。

# 3. Mogulと活用例

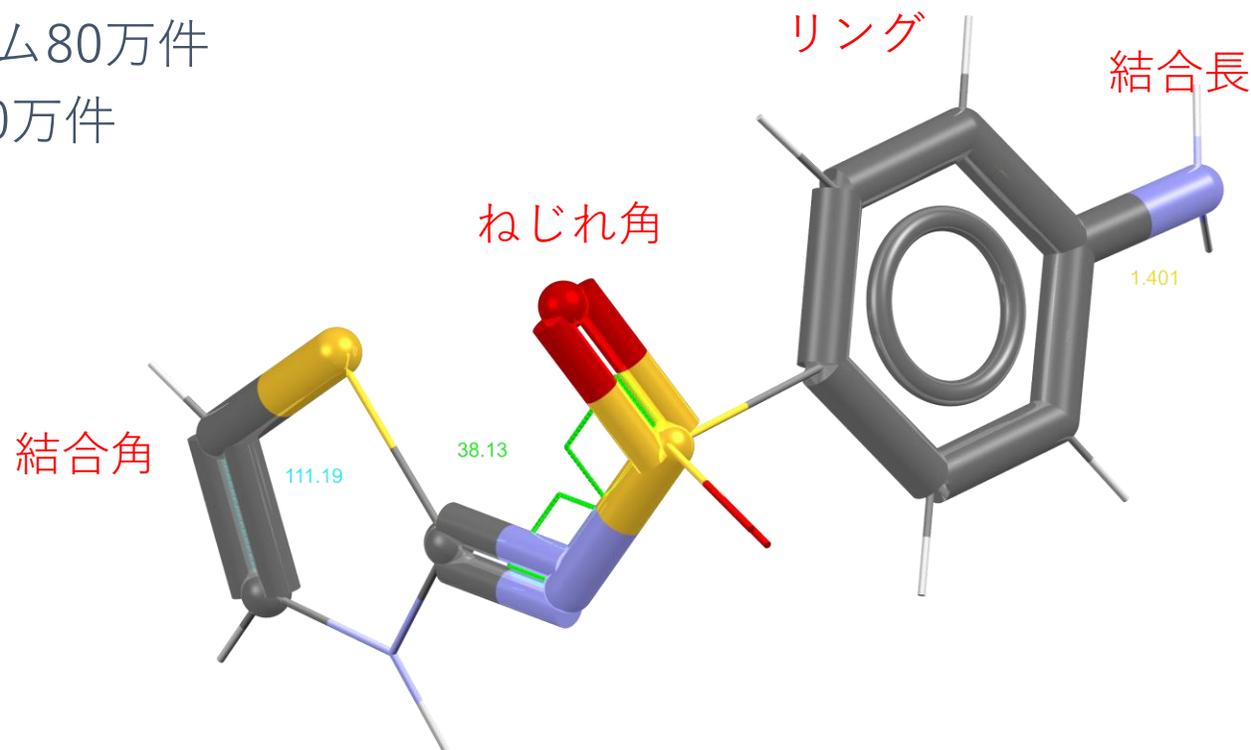


## 3-1. Mogul(モーグル)とは



CSDの94万件の結晶構造(座標データ)から抽出された

- 2800万件の結合長→ヒストグラム200万件(結合の種類)
  - 4000万件の結合角→ヒストグラム300万件(結合角の種類)
  - 1400万件のねじれ角→ヒストグラム80万件
  - 200万件のリング→ヒストグラム40万件
- をライブラリー化したもの



(この情報、少々古いです)

## 3-2. Mogulの使い方

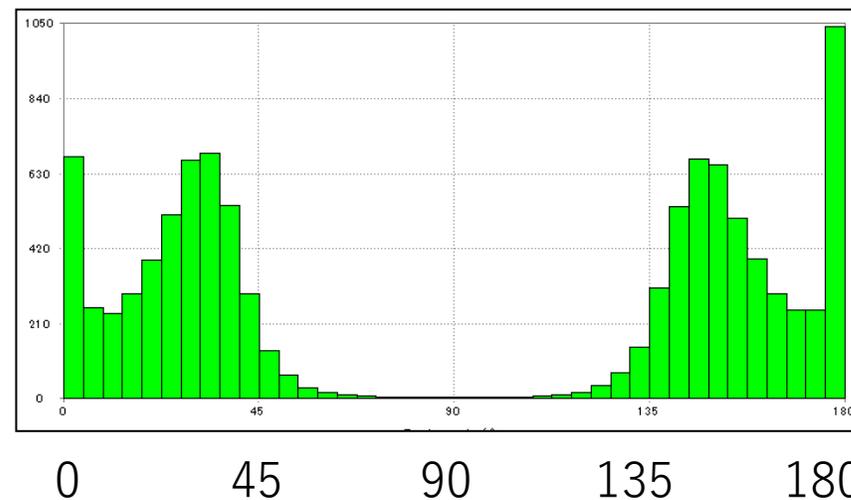
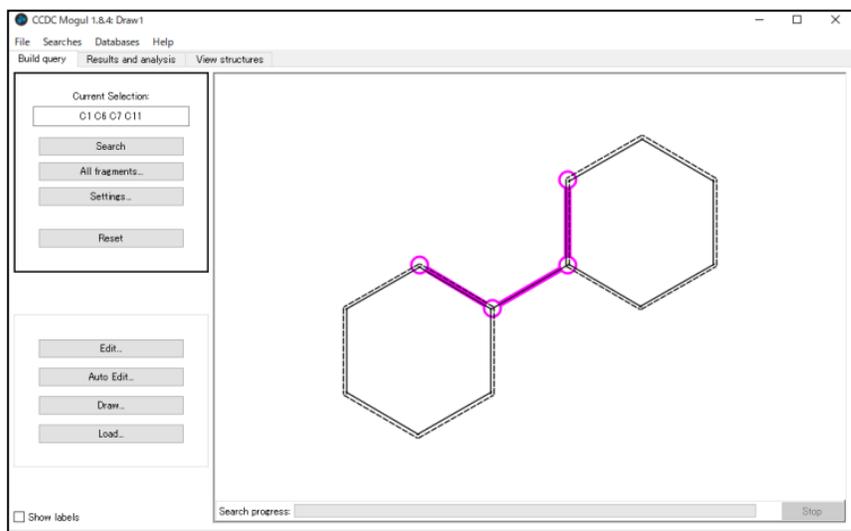


Mogul または Mercury → CSD-Core → Launch Mogul

Q. ビフェニルのねじれ角の分布は？

A. 平面と35度あたりにピーク

1. Search →

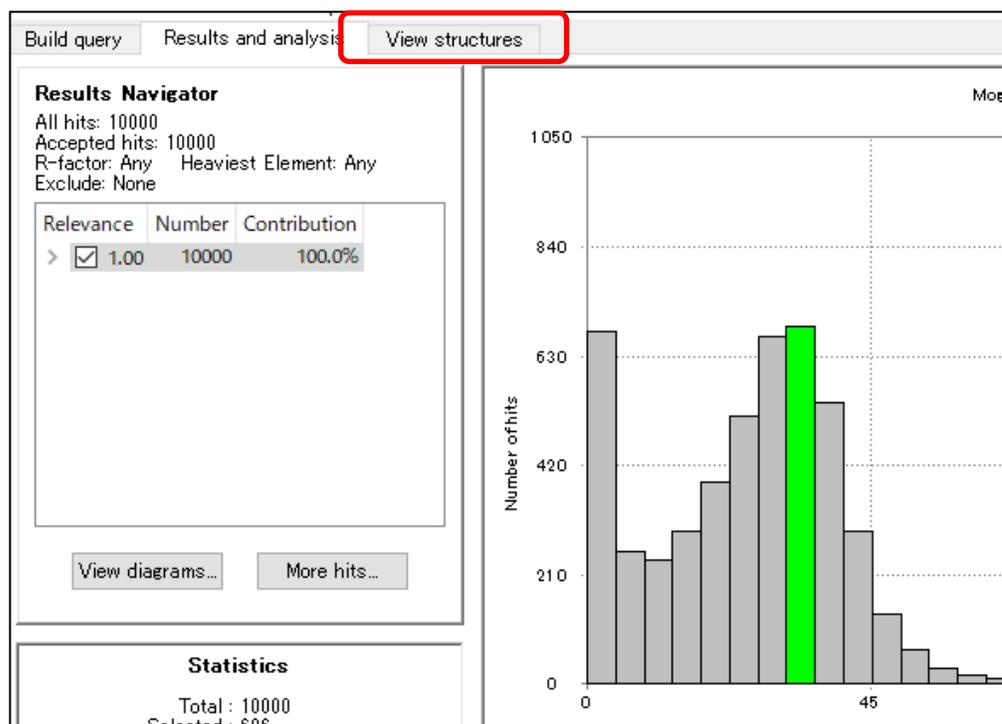


# 3-3. どんな分子が含まれているか？



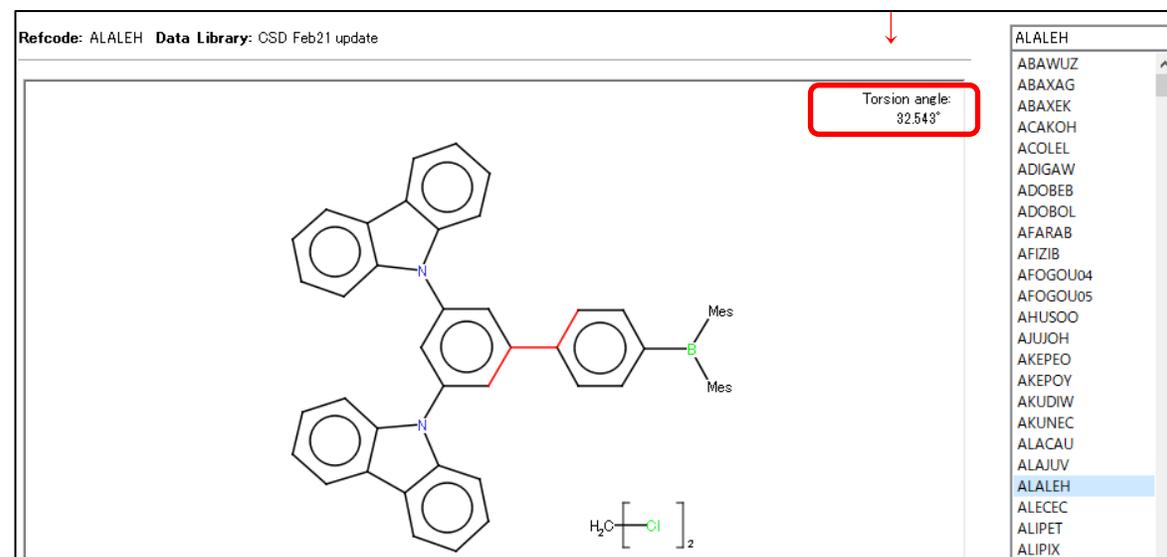
View Structuresのタブからヒストグラム中の化合物を確認可能

3. View Structures



2. 注目している角度を選択

4. Torsion



5. 該当するTorsionが複数ある場合



## Mogul 中で3D構造の確認が可能

Information    Refcode: AGUPEY    Data Library: CSD 5.41

Diagram

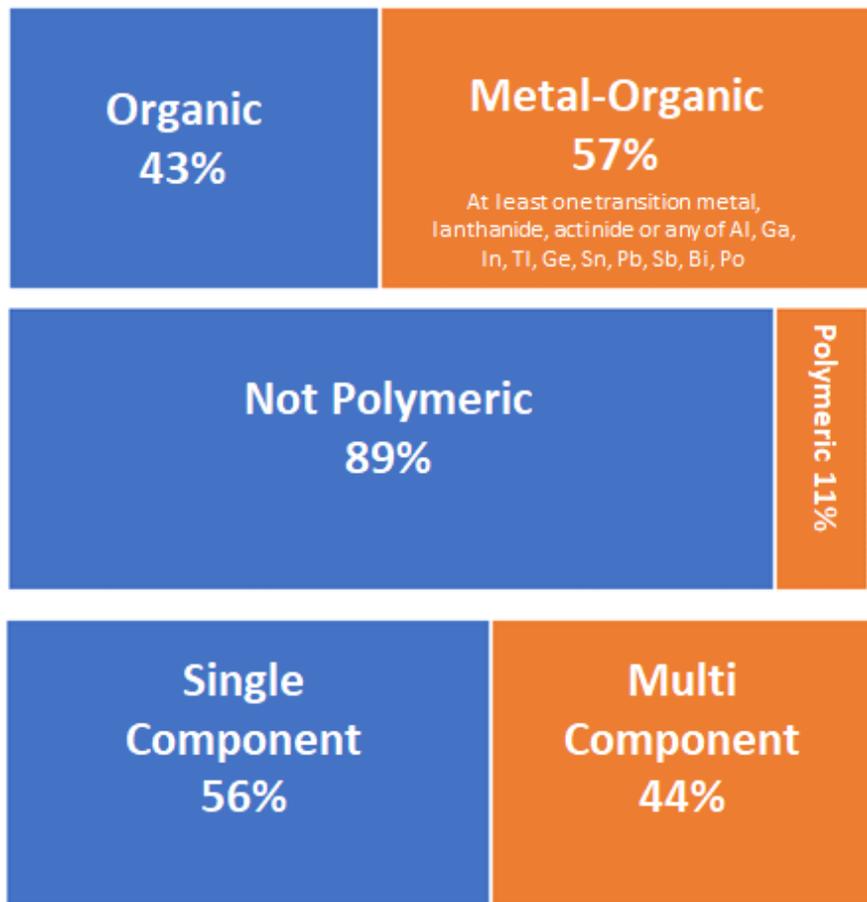
**3D Visualiser**

3D Visualiser

AGUPEY

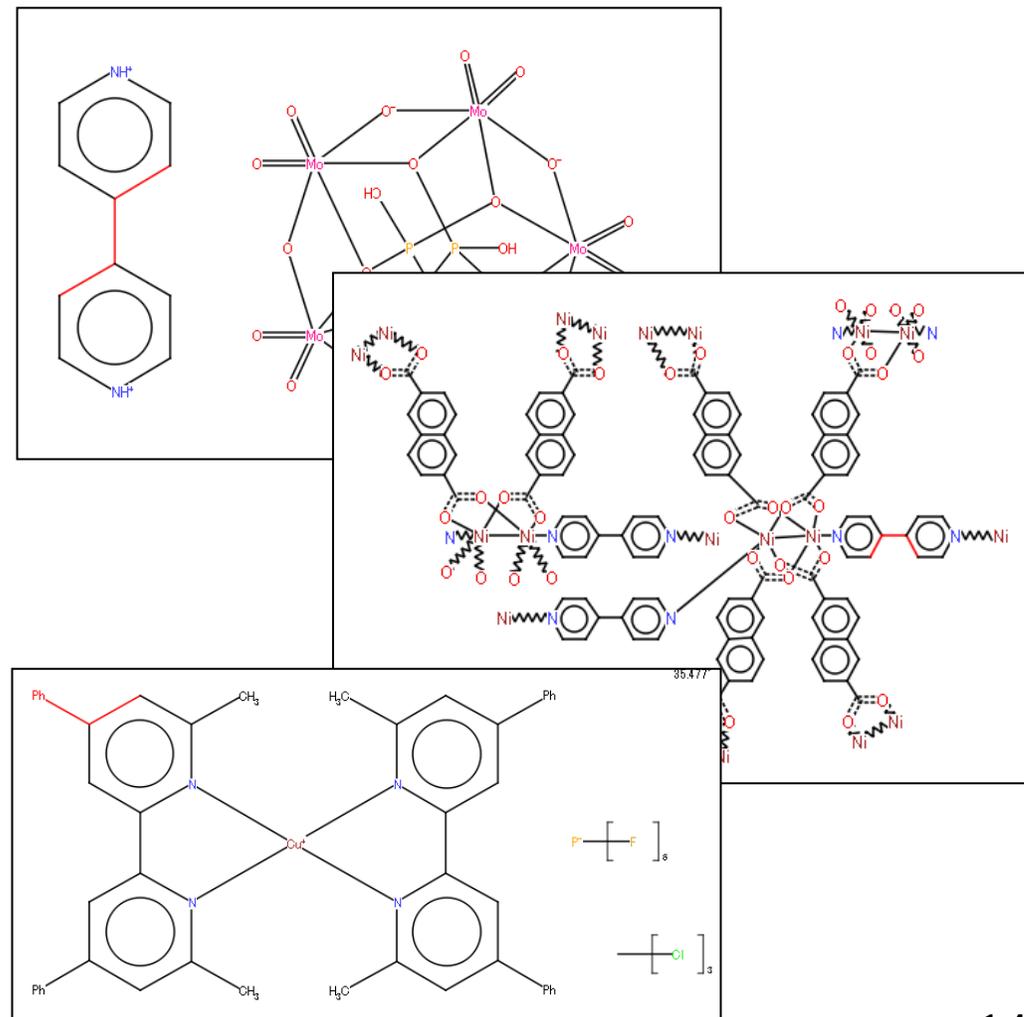
- ABUBUV
- ACAKOH
- ADIGAW
- AFALUP
- AFAVAF
- AFIYOG
- AFIZOH
- AFOTOF
- AGUPEY**
- AHOZEC
- AKASEM
- AKOBOT
- AMABOH
- AMIDEF
- ANARIR
- APAYUN
- ARABAY
- AROLAW
- ASETUO
- ASEXED
- ASOYAK02
- ATEXUT
- AVELAQ
- AVESOL
- AXILOI

# What's in the CSD?

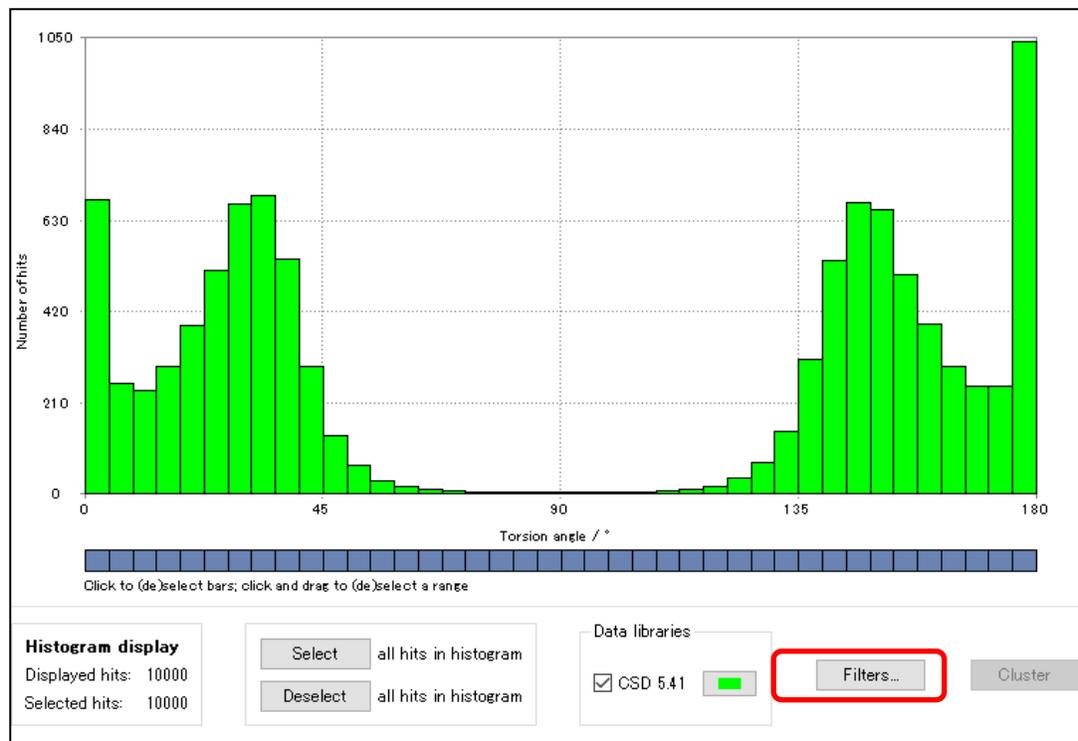


Polymeric = MOFのような連続的な構造

金属錯体が結構入っている。



# 金属錯体を除きたい

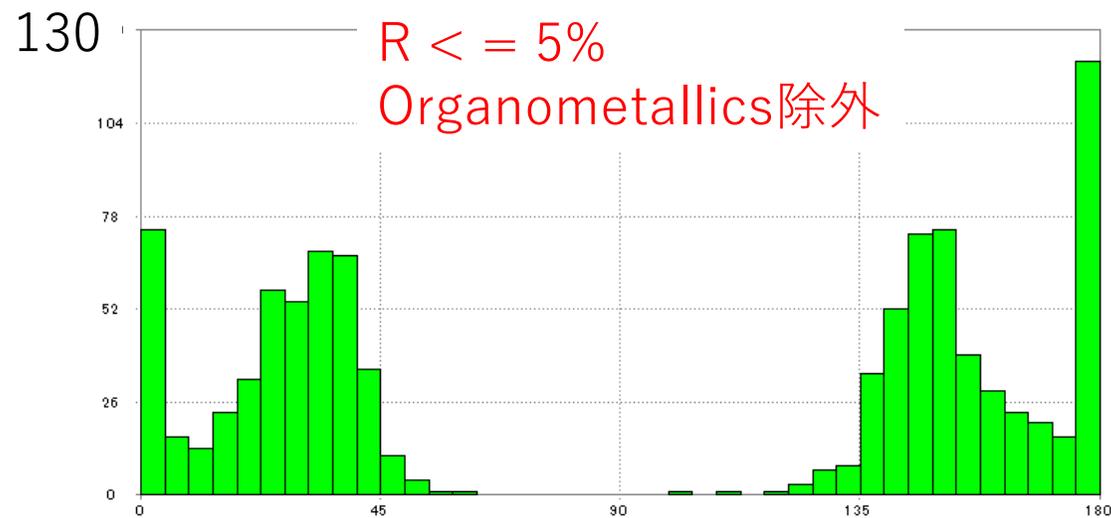
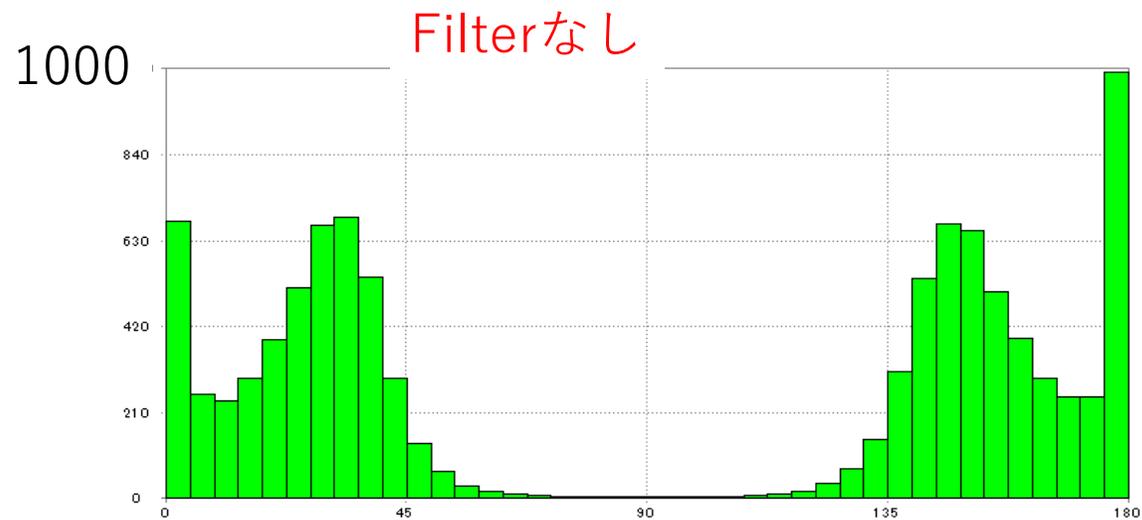


↑  
Filters

### Apply Filters

Available filters

- R-factor  $\leq 5.0\%$
- Exclude Solvents
- Heaviest Element U
- Exclude Organometallics
- Exclude Powder structures



ヒストグラムの形状としては、相似形。  
→金属に配位している場合も  
ねじれ角は大きくは変わらない。

## 3-4. Mogulでできることは？



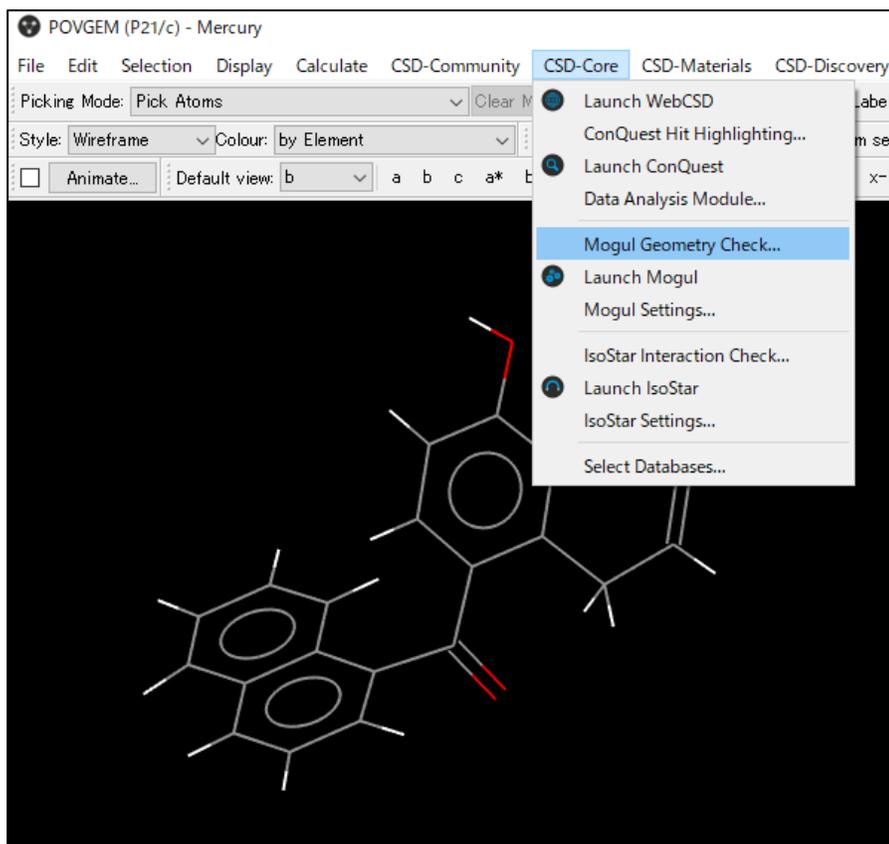
ここまでは、2D構造を描いて該当するねじれ角のヒストグラム(一般的な角度分布がどうなっているか)を確認した。



自分が解析した分子構造に問題がないかどうかを確認するのに使えないか？



Mercuryにcifなど読み込む→CSD-Core  
→Mogul Geometry check



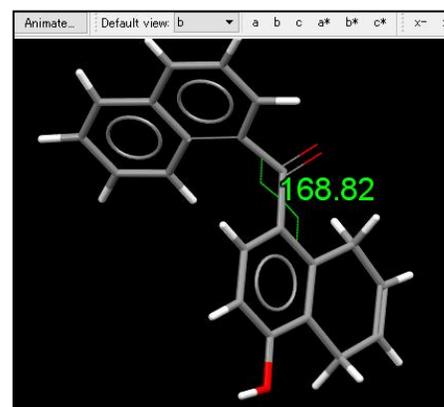
torsion

O2 C11 C4 C3	Not unusual (enough hits)	1459	164.421
C3 C4 C11 C12	Not unusual (enough hits)	1445	-13.582
O2 C11 C12 C13	Not unusual (enough hits)	115	-56.884
C13 C12 C11 C4	Not unusual (enough hits)	115	121.255
O2 C11 C12 C20	Not unusual (enough hits)	109	118.684
C20 C12 C11 C4	Not unusual (enough hits)	109	-63.178
O2 C11 C4 C10	Unusual (enough hits)	730	-13.180
C10 C4 C11 C12	Unusual (enough hits)	725	168.817

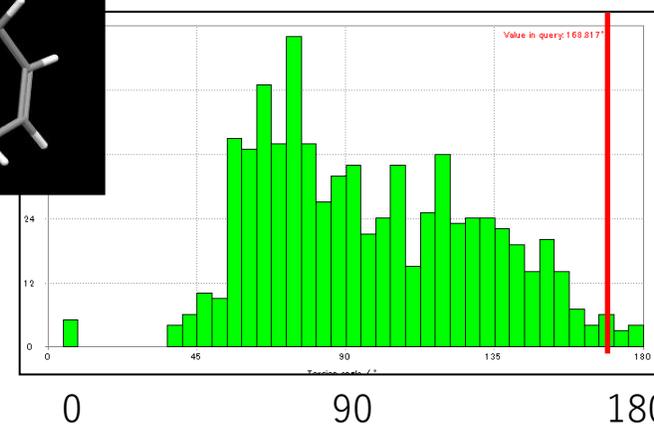
bond

O1 C1	Not unusual (enough hits)	10000	1.356	1.359
O2 C11	Not unusual (enough hits)	7563	1.229	1.224

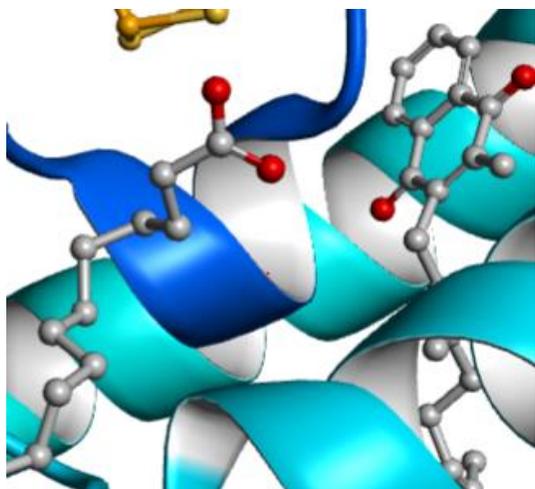
赤：警告



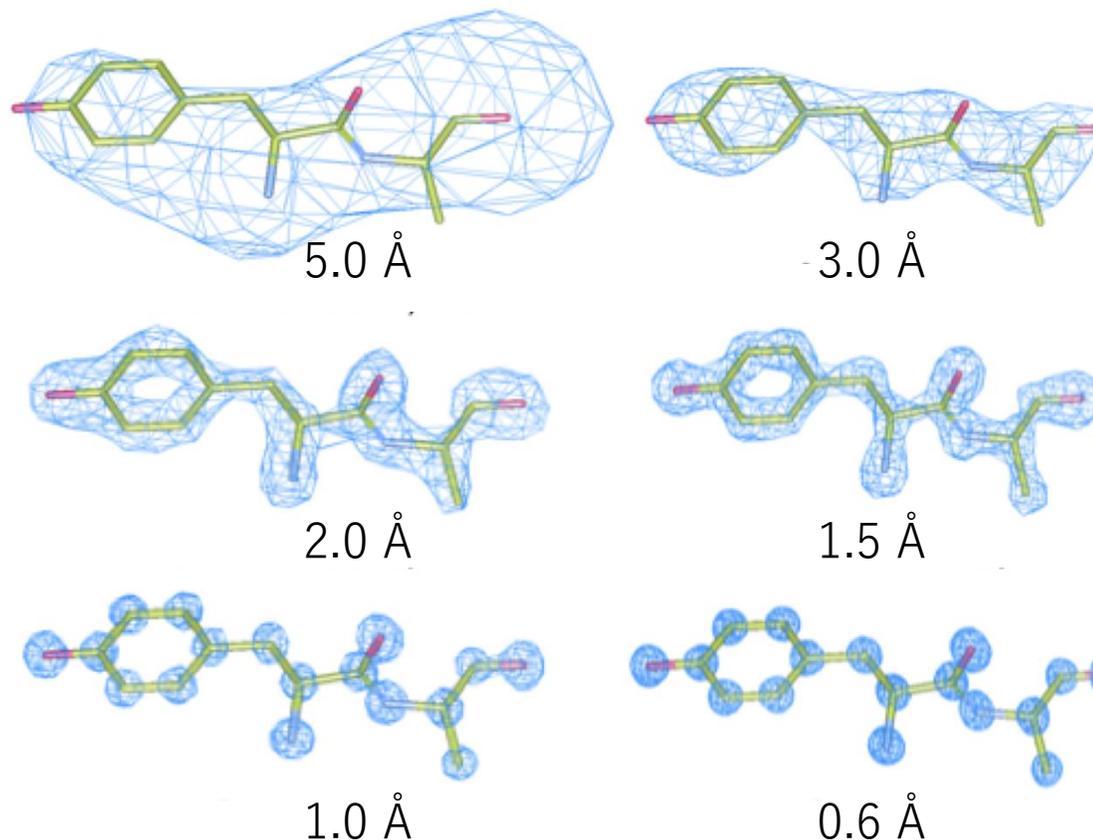
分布の中では、  
平面に近い構造 ↓



# 3-5. 蛋白質の構造解析への活用例



PDB: 8RQZ  
分解能(高): 2.65Å



芳香環 = 1.34 Å  
C-C = 1.53 Å

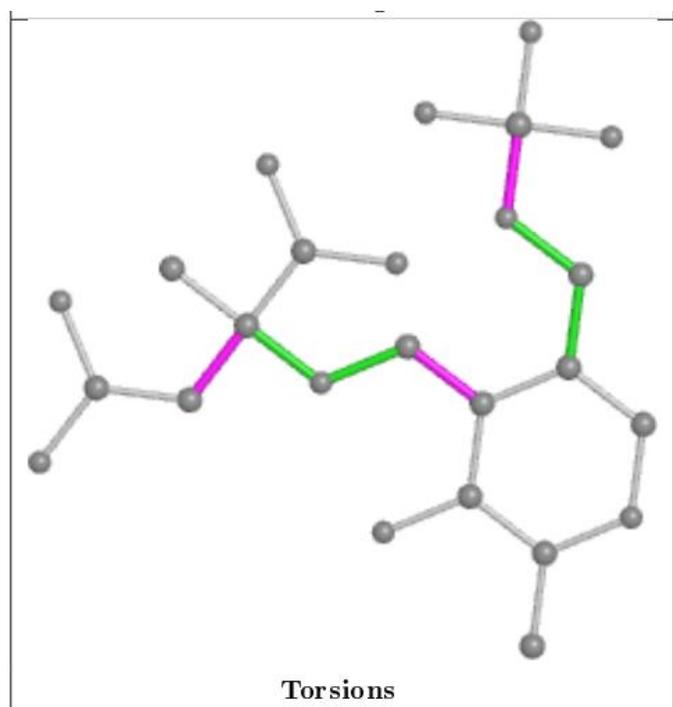
一般的 PDB  
の構造

一般的 CSD  
の構造

# PDBのLigand validationに活用されている

蛋白質の構造をPDBに登録する際、リガンドの構造が妥当か、Mogulで確認した結果がレポートに記載される。

<https://www.ebi.ac.uk/pdbe/entry/pdb/1ajs/experiment>



... For torsion angles, if less than 5% of the Mogul distribution of torsion angles is within 10 degrees of the torsion angle in question, then that torsion angle is considered an outlier. Any bond that is central to one or more torsion angles identified as an outlier by Mogul will be highlighted in the graph. For rings, the root-mean-square deviation (RMSD) between the ring in question and similar rings identified by Mogul is calculated over all ring torsion angles. If the average RMSD is greater than 60 degrees and the minimal RMSD between the ring in question and any Mogul-identified rings is also greater than 60 degrees, then that ring is considered an outlier.

ピンク：外れ値 (outlier)

緑：問題なし

グレー：十分なヒット数なし

[S Gore et al, Structure 25, 1916 \(2017\).](#)

# 3-6. よくある質問：ConQuestとの違いは？



ConQuestで検索

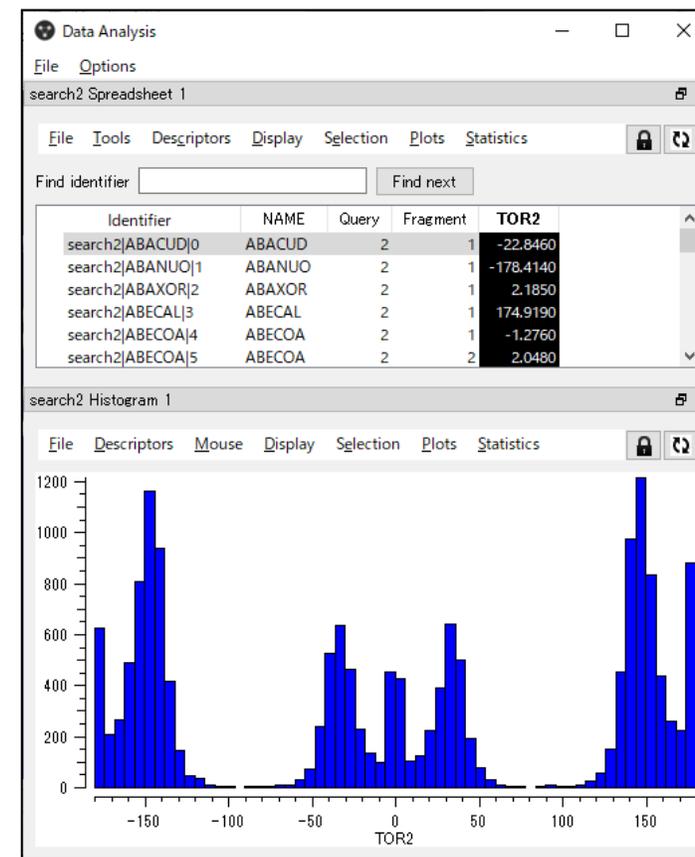
ADD 3D

The screenshot shows the ConQuest software interface. On the left, a 3D model of a molecule is displayed with green highlights on specific atoms and bonds. A red box highlights the 'ADD 3D' button in the left-hand menu. On the right, the 'View Results' window shows a list of search results for the query 'ABRBPB'. The 'Parameters' section is highlighted with a red box, showing 'TOR2' with a value of 144,104. The list of results includes various identifiers and their corresponding values for TOR2.

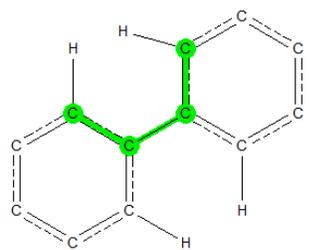
Identifier	NAME	Query	Fragment	TOR2
search2[ABACUD]0	ABACUD	2	1	-22.8460
search2[ABANUO]1	ABANUO	2	1	-178.4140
search2[ABAXOR]2	ABAXOR	2	1	2.1850
search2[ABECAL]3	ABECAL	2	1	174.9190
search2[ABECOA]4	ABECOA	2	1	-1.2760
search2[ABECOA]5	ABECOA	2	2	2.0480



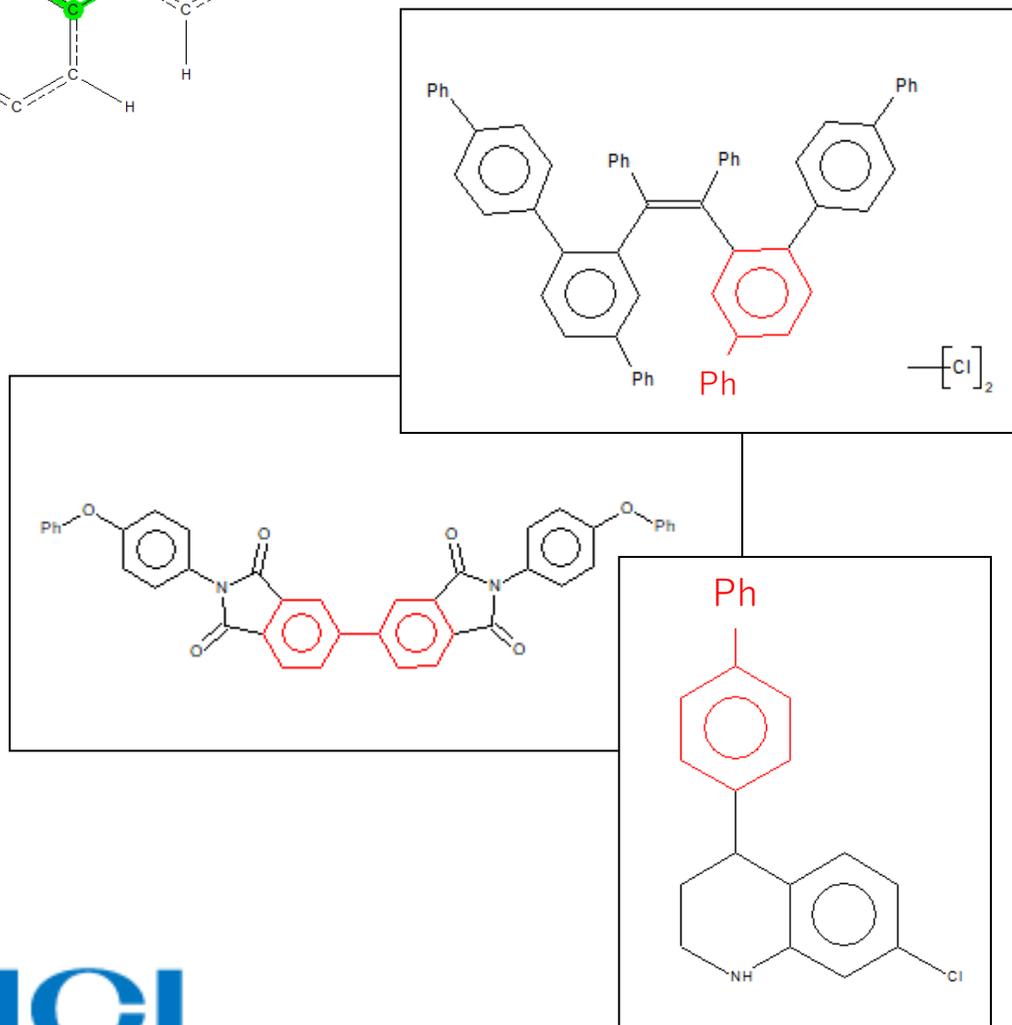
Mercuryの統計機能で表示



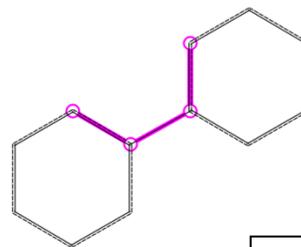
## ConQuestの場合：



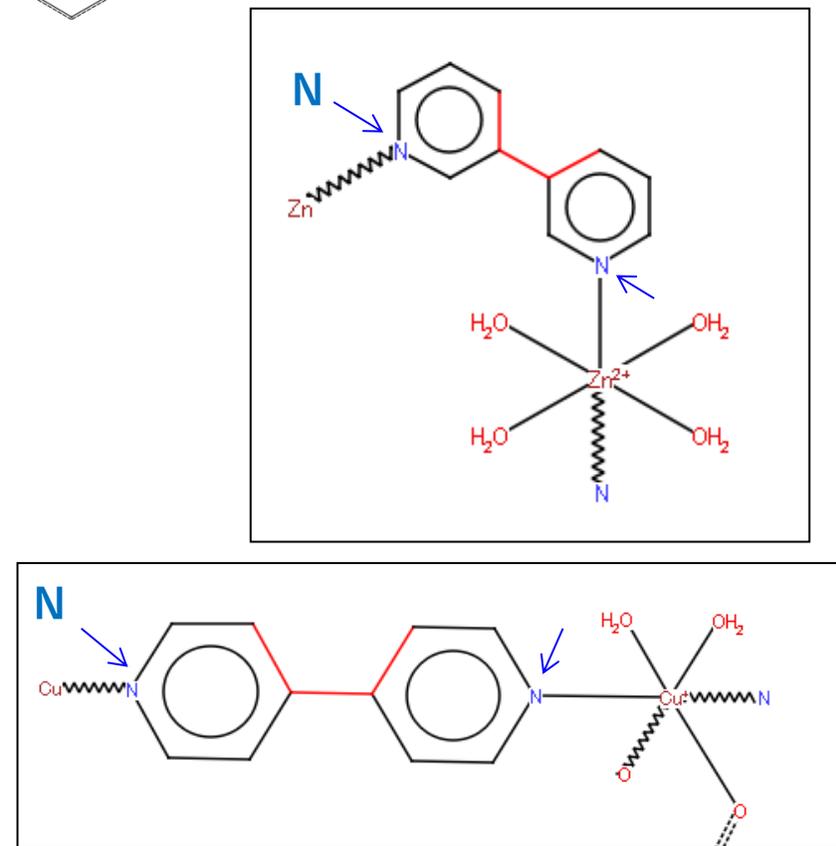
作図した条件に合う構造が抽出される



## Mogulの場合：



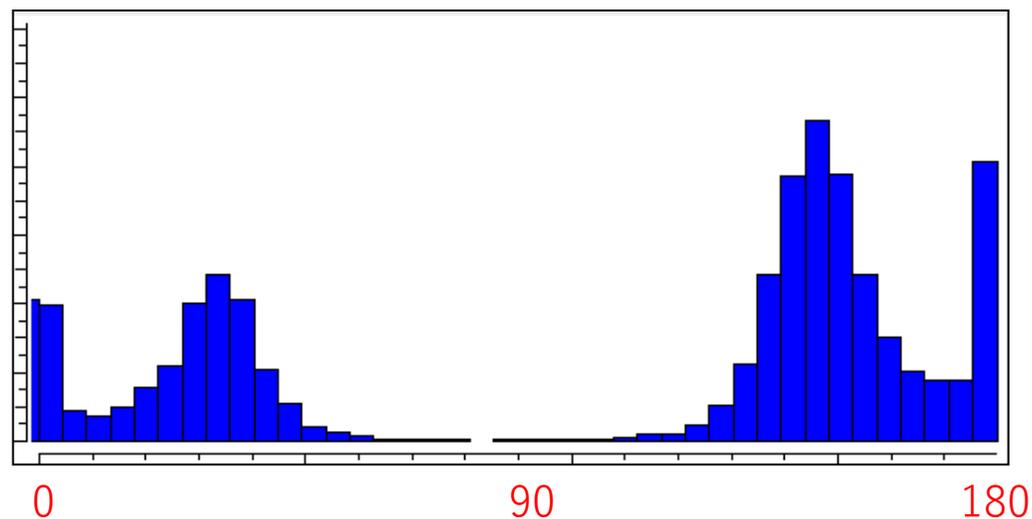
同じ環境は2つ先の結合まで



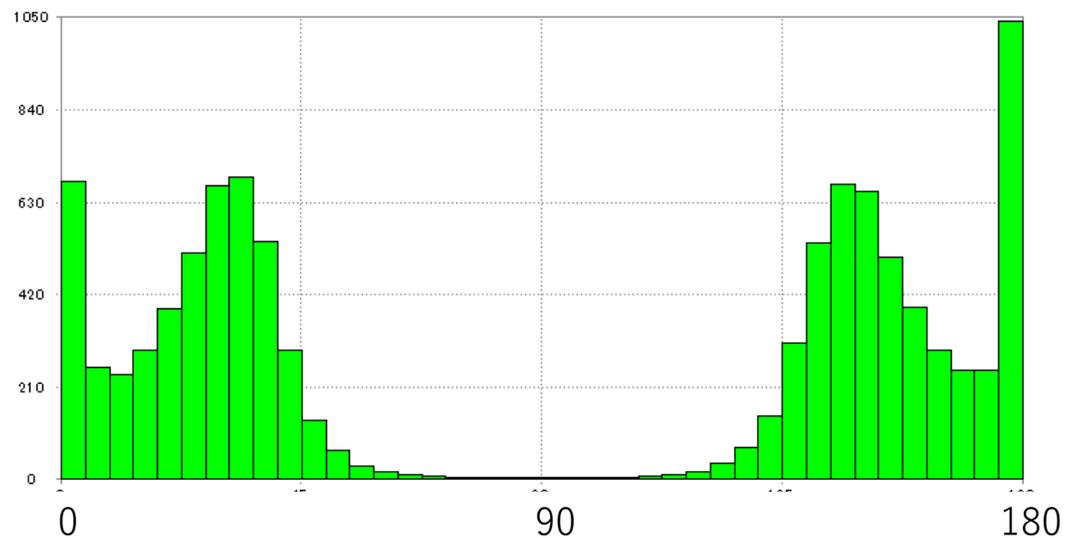
# 分布の確認



ConQuestの場合



Mogulの場合

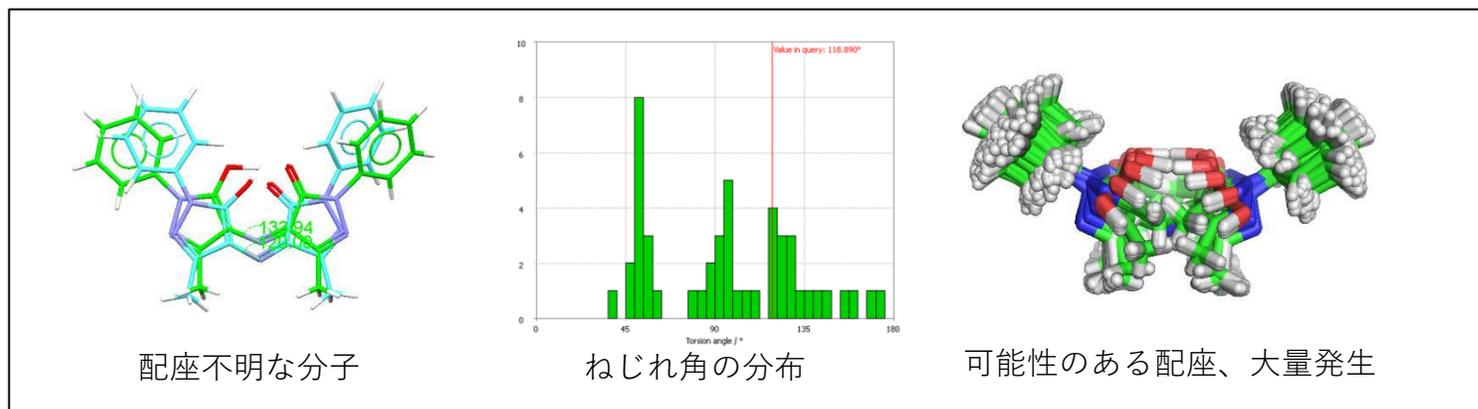


★ConQuestと比較し、  
Mogulの方が圧倒的に検索時間が短い。  
→ Mogulで代用できる

# 3-7. Mogulを活用したアプリケーション



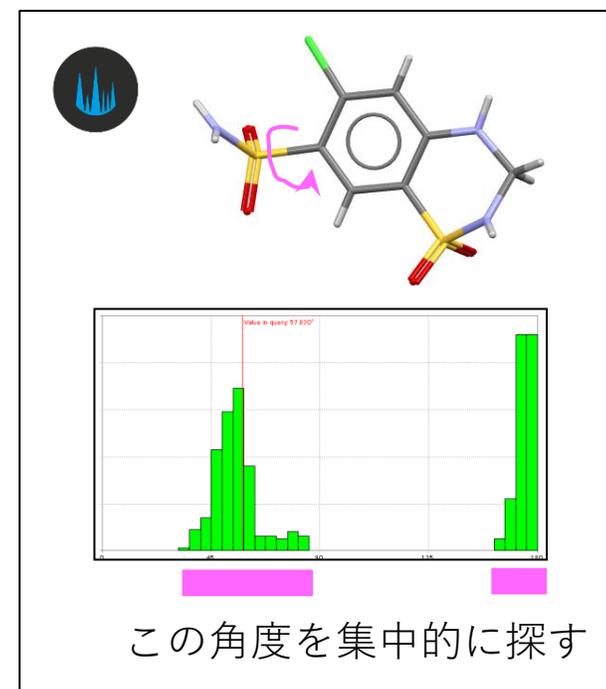
- ◆ Conformer Generator: 3D不明分子に対し、可能性のある分子配座を自動発生
- ◆ 粉末結晶構造解析 DASH: ねじれ角のふり幅を限定
- ◆ SmartLab Studio II (リガク): リートベルト精密化の束縛条件
- ◆ PDB: リガンド構造の評価
- ◆ BUSTER(Global Phasing): 蛋白質の構造解析
- ◆ TorsionAnalyzer (BioSolveIT)ほか  
いろいろなプログラムに活用されている。



Conformer Generator: CSD-Materials & CSD-Discovery付属



★ドッキング用、リガンドの配座発生に活用



DASH/Mogul連携

# 4. IsoStarと活用例





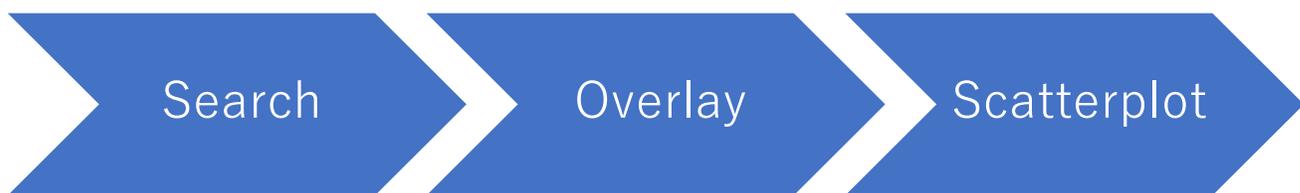
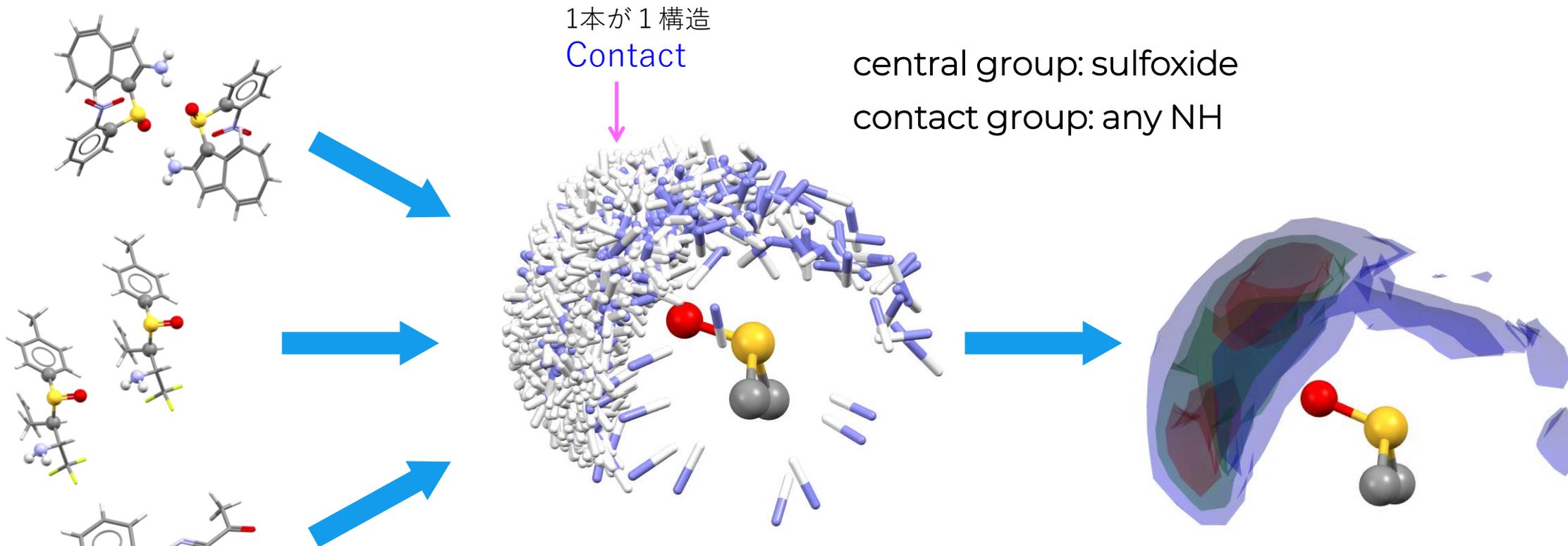
## 4-1. IsoStar(アイソスター)とは

CSDとPDBの座標データから抽出された分子間相互作用を可視化したもの



“Isostar: A library of information about non-bonded interactions”  
Bruno I. J., Cole J. C., Lommerse J. P. M., Rowland R. S., Taylor R. and Verdonk M. L.  
*J. Comput.-Aided Mol. Des.*, **11**, 525-537 (1997).  
[DOI: 10.1023/A:1007934413448]

# 4-2. IsoStarの原理 (methodology)



相互作用しているもののみ：  
vdWより近い距離にあるもの



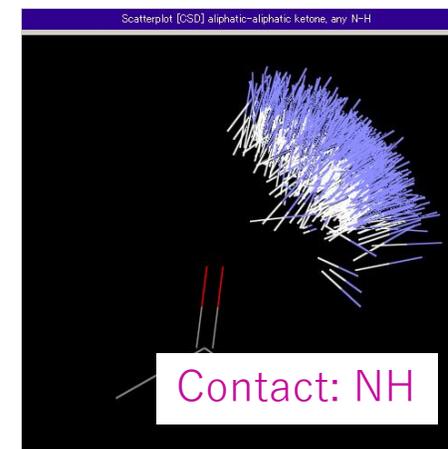
# 4-3. IsoStarの使い方

Mercury → CSD-Core → Launch IsoStar または [isostar.ccdc.cam.ac.uk](http://isostar.ccdc.cam.ac.uk)

## 1. Central: C=O

The screenshot shows the IsoStar 2.2 interface. The 'Ligand Terminal' tab is selected. Under 'Central', the 'aliphatic-aliphatic ketone' option is highlighted with a red circle. The chemical structure of an aliphatic-aliphatic ketone is shown as Csp3-C(=O)-Csp3. The 'Contact' section is also visible, with a red box around the 'Ligand' and 'Acyclic links' categories.

341 central groups  
58 contact groups



## 2. Contact: C,H only| N-H| O-H| Other N or O| Sulfur| Halo/halide| Amino acid

O-H				
Links to statistical data	Links to theoretical energy data			
Contact Group	CSD	PDB	Stats	Theory
any OH	1523	218		
alcohol OH	499	36		
phenol OH	254	18		
water	175	164		

\* This search has not been done.

1. Contact/Central groupの距離を  
スライダーで調整

2. Hyperlinkに☑を入れ、1本をクリックすると  
右の画面にその構造が表示される

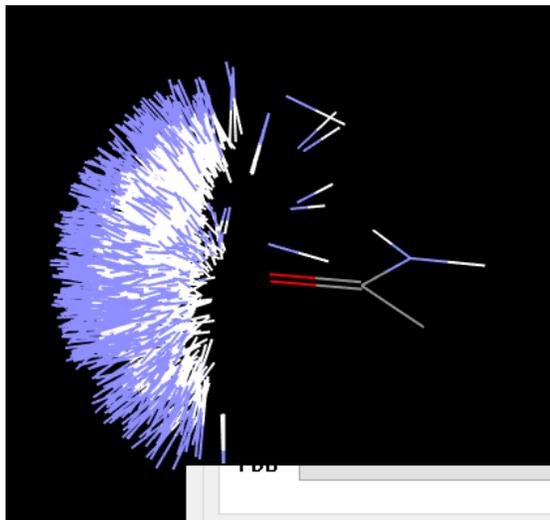
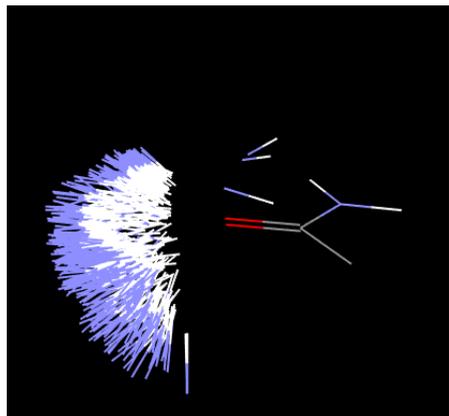
The image shows the IsoStar software interface. At the top, there are sliders for 'Lower Limit' and 'Upper Limit' for 'Show contacts in van der Waals (vdW) corrected distance range'. The 'Lower Limit' slider is set to approximately 0.35 nm, and the 'Upper Limit' slider is set to approximately 0.55 nm. Below these sliders, there is a checkbox labeled 'Hyperlink (Clicking on scatterplot atoms adds parent structure to Hyperlinks tab)' which is checked. The main window is split into two panes. The left pane shows a scatterplot of contacts for 'Scatterplot [CSD] carbamoyl (N,Q), any N-H'. The right pane shows a 3D ball-and-stick model of the molecule with a specific contact point highlighted in red. A separate window on the right shows a 3D surface representation of the molecule.

3. Scatter plotを  
対称に表示したい

Scatterplot Symmetry

Expand

Contract



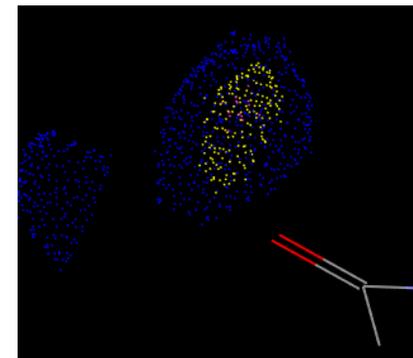
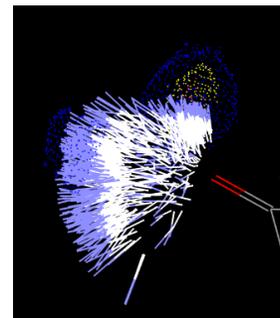
5. Scatter plotを  
非表示にしたい

Show contacts in van der Waals (vdW) correct

Lower Limit

Upper Limit

Hide All



4. 密度マップを表示したい

Contour Surfaces

Show All Hide All Create/Edit...

Hyperlink ( Clicking on scatterplot atoms adds parent structure to Hyperlink )

Scatterplot [CSD] carbamoyl

Create New IsoStar Contour Surfaces

Internal Scaling ( 0 < Level <= 100 )  External Scaling ( 0 < Level <= 100 )

Create 3 new surface(s) using Probe nitrogen  Custom grid

Color	<input type="color" value="#FF00FF"/>	Level	75
Color	<input type="color" value="#FFFF00"/>	Level	50
Color	<input type="color" value="#0000FF"/>	Level	25

Change Level, Color or Visibility of Existing Surfaces for Current Scatterplot

Current Scatterplot [CSD] carbamoyl (N,Q), any N-H

Probe	Level	Scaling	Color	Show
1 nitrogen	75,000	Internal	<input type="color" value="#FF00FF"/>	<input checked="" type="checkbox"/>
2 nitrogen	50,000	Internal	<input type="color" value="#FFFF00"/>	<input checked="" type="checkbox"/>
3 nitrogen	25,000	Internal	<input type="color" value="#0000FF"/>	<input checked="" type="checkbox"/>

←密度マップの色やしきい値変更可能

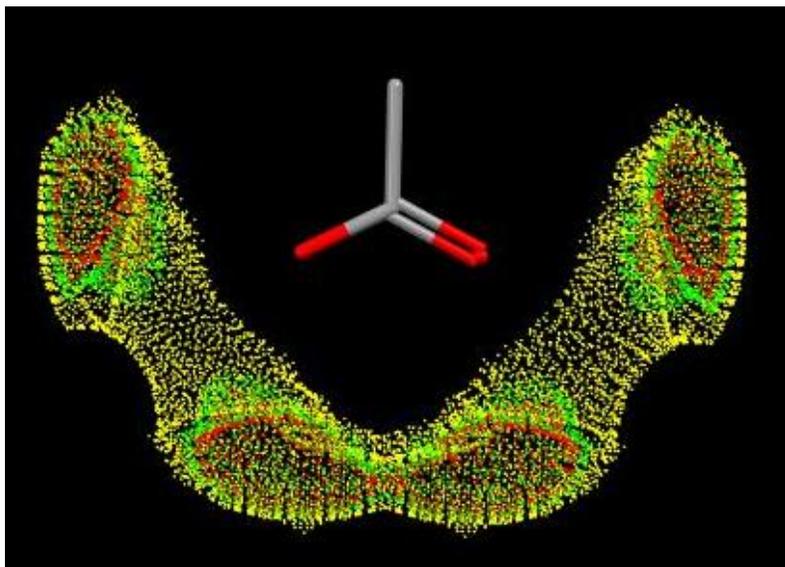
←非表示にしたいものは  
チェックマークを外す



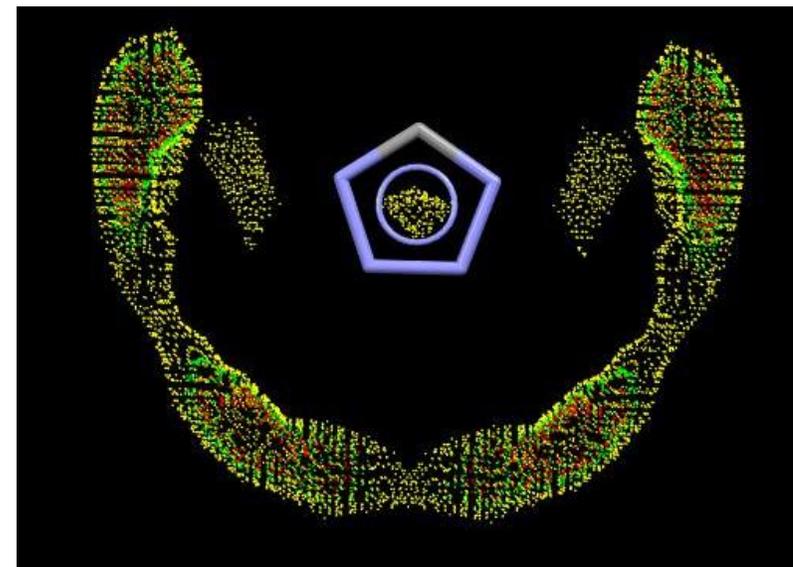
## 4-4. IsoStarでできることは？

置換基を変えても同じ相互作用分布を持つ分子を作りたい。

→分子設計



Carboxyl-NH 相互作用

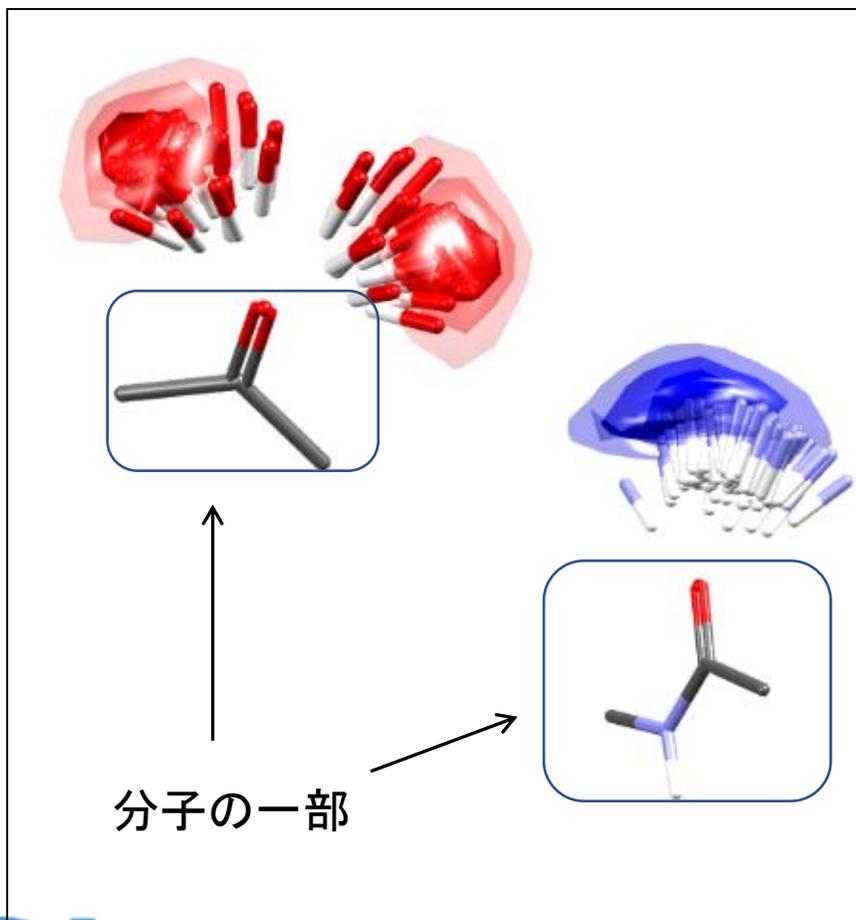


Tetrazole-NH 相互作用

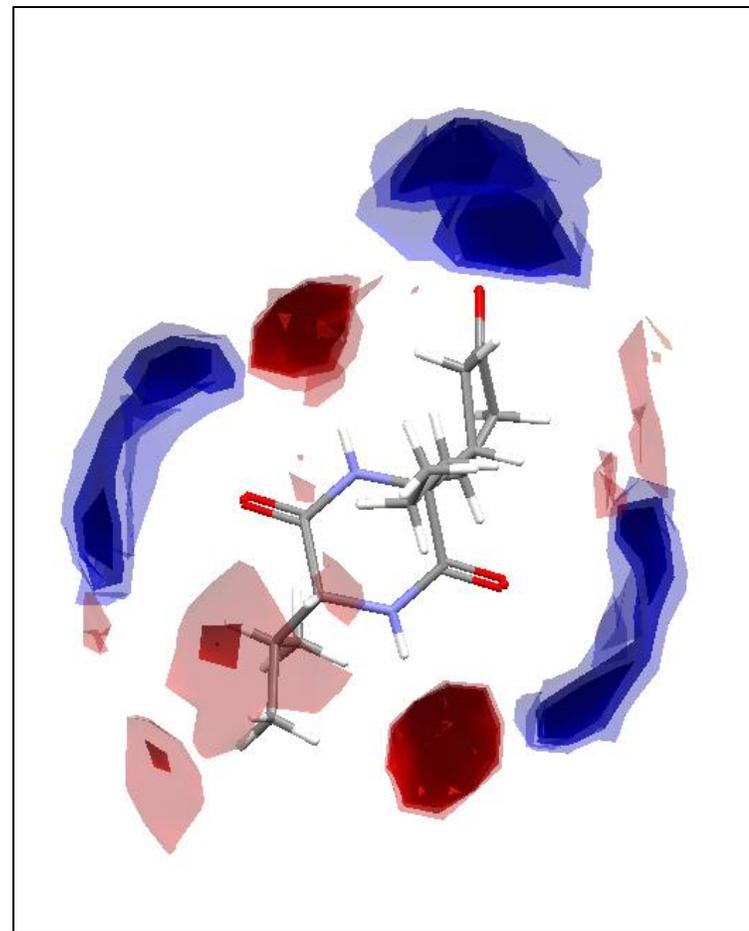
### Bioisosteres

## 4-5. IsoStarを使ったアプリケーション

IsoStarの場合



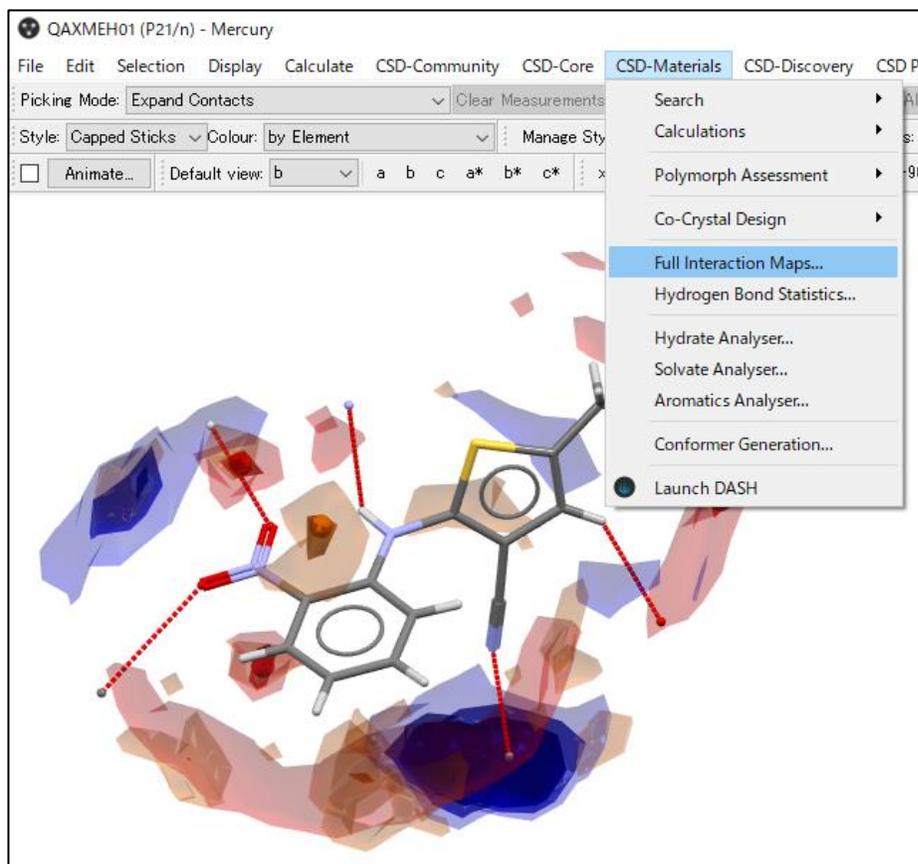
Full Interaction Map (分子全体)



CSD-MaterialsとCSD-Discoveryに付属



# Mercury→CSD-Materials →Full Interaction Maps



Full Interaction Maps

Options Maps Hotspots Log Files

Map Contour Levels

- Display first contour with initial level of 2.0
- Display second contour with initial level of 4.0
- Display third contour with initial level of 6.0

Hotspots

- Generate hotspots in the map

Probe

Probe	Colour
<input checked="" type="checkbox"/> Uncharged NH Nitrogen	Blue
<input type="checkbox"/> Charged NH Nitrogen	Light Blue
<input type="checkbox"/> RNH3 Nitrogen	Dark Blue
<input type="checkbox"/> Alcohol Oxygen	Red
<input checked="" type="checkbox"/> Carbonyl Oxygen	Red
<input type="checkbox"/> Water Oxygen	Light Blue
<input type="checkbox"/> Oxygen Atom	Red
<input type="checkbox"/> Methyl Carbon	Yellow
<input checked="" type="checkbox"/> Aromatic CH Carbon	Orange
<input type="checkbox"/> C-F Fluorine	Green
<input type="checkbox"/> C-Cl Chlorine	Light Green
<input type="checkbox"/> C-Br Bromine	Brown
<input type="checkbox"/> C-I Iodine	Purple

Defaults

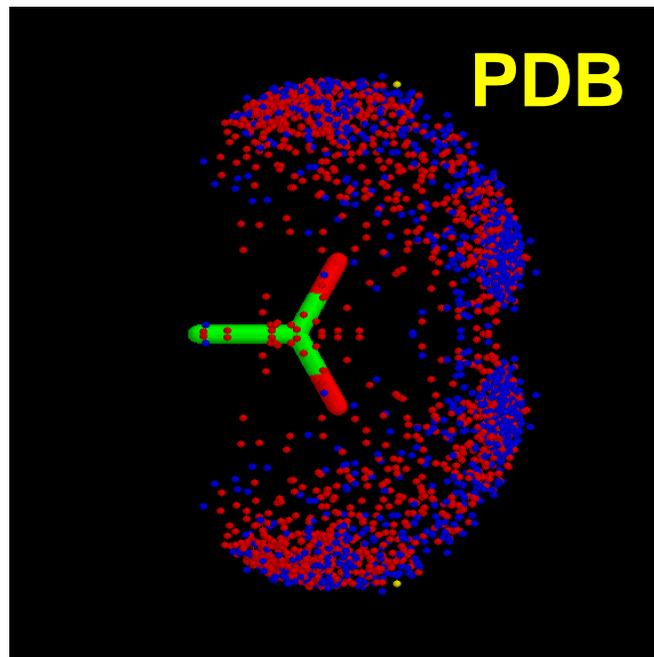
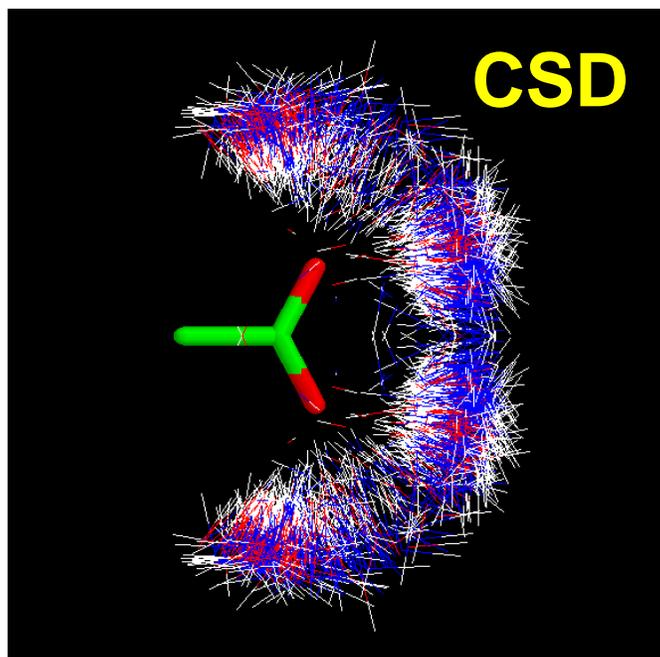
Calculate Maps Clear Maps & Hotspots Load Maps... Save Maps... Close

IsoStarのcontact group (58) → FIMのProbe (13)

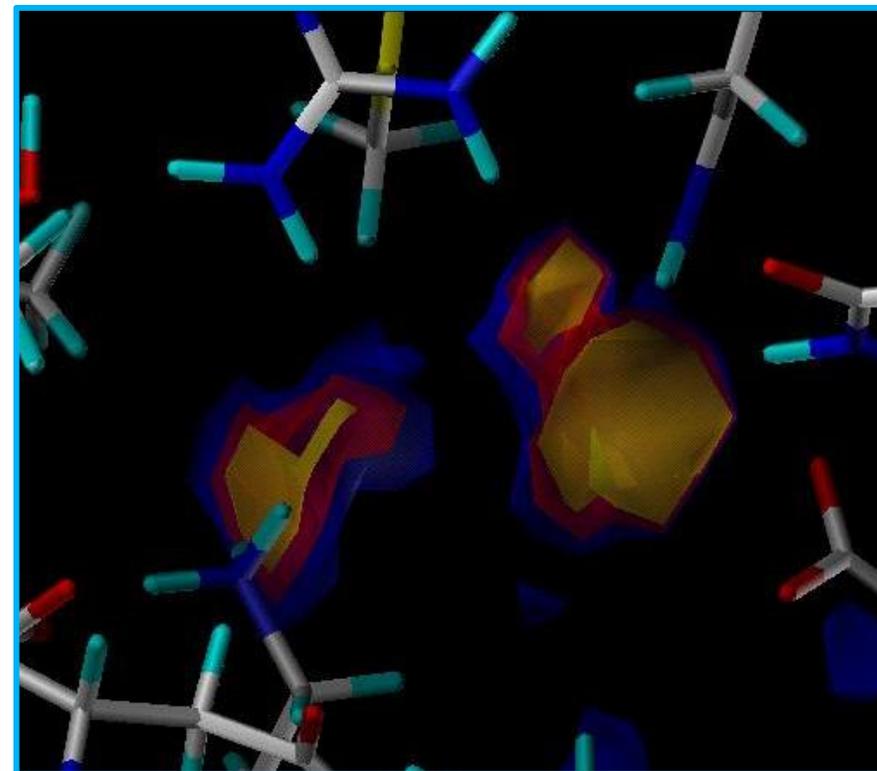
★活用例については、植草先生の講演にて

ところで、CSDとPDBでIsoStarの分布は変わらない

蛋白質の表面にIsoStar plotを表示 → SuperStar (CSD-Discover付属)



O-H & N-H donors around a carboxylate group



# まとめ

## Applications



Full Interaction Maps,  
SuperStar, CSD-CrossMiner  
Conformer Generator, GOLDなど  
→問題解決のためのツール

## Knowledge



Mogul：分子ジオメトリー  
IsoStar：分子間相互作用  
→Knowledgeに変換

## Data



結晶構造データ  
→登録、集合化、検索と表示

CCDC

Deposit Structures    Access Structures    Contact I

Home    Solutions    **Community**    Discover    Consultancy Services

Community    Access/Deposit Structures

CCDC for the Community

Education and Outreach

Events

Free Products

**Training and Learning**

Free Online Courses

Self-Guided Workshops

Training and Support Videos

★ → Newsletter

# 学習用資料： CCDCのwebsite

★ Newsletterに登録すると  
CCDC主催のwebinar等の  
お知らせを受け取れます。

## Training and Learning

**CSDU: On-Demand Learning**

A series of on-demand training modules where **U** can learn how to harness cheminformatics and data insights from the CSD to use in your work.

Explore CSDU modules

**Self-Guided Workshop Materials**

The CCDC is continually developing tutorials and guides for hands-on workshops. From this page, you can access our self-guided workshops to use for your personal training on the CSD-Portfolio or in your own courses or labs.

Explore workshop materials

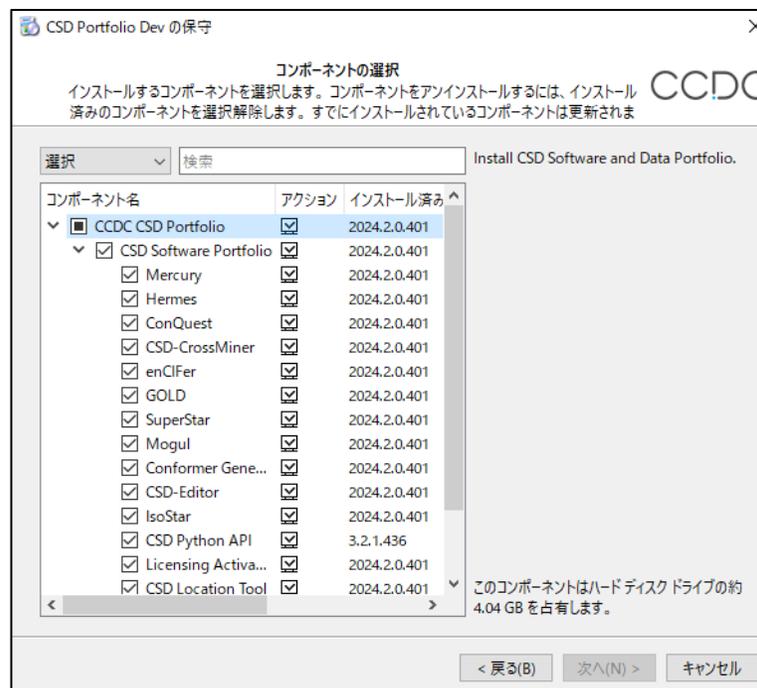
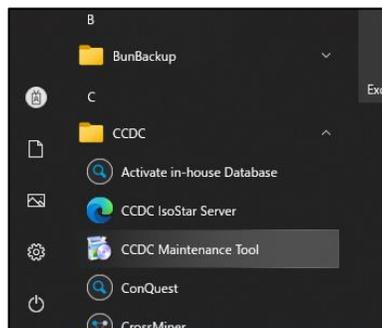
**Software Training and Support Videos**

Find our latest videos, from software training short how-to video tutorials to introduce you to the practical aspects of new functionalities, to presentations and instructions of our services and resources, to talks and more.

View playlists

# お知らせ

CSD Portfolio (CSDのパッケージ)は、  
必要なもののツールのみを選択インストール可能となりました。  
CCDC Maintenance Toolを使うと、インストール後に不要のものを削除することも可能です。  
→注意点として、マークを外すと、そのツールが削除されます。



使いにくいと思った点、改良案などございましたら、  
ご連絡ください。<crystal@jaici.or.jp>