

はじめに

栗栖源嗣

大阪大学蛋白質研究所
蛋白質結晶学研究室・教授

Background

1965

Dr Olga Kennard set up the Cambridge Crystallographic Data Centre (CCDC)



Dr Olga Kennard, founder of the CCDC and CSD

CRYSTALLOGRAPHY

Protein Data Bank

A repository system for protein crystallographic data will be operated jointly by the Crystallographic Data Centre, Cambridge, and the Brookhaven National Laboratory. The system will be responsible for storing atomic coordinates, structure factors and electron density maps and will make these data available on request. Distribution will be on magnetic tape in machine-readable form whenever possible. There will be no charge for the service other than handling costs. Files

From "History of the CCDC and the CSD"

<https://www.ccdc.cam.ac.uk/about-us/history-of-the-ccdc/>

Nature New Biology **233**, page 223 (1971)

CSDのコンテンツ

- 有機化合物, 有機金属化合物の結晶構造データベース。
- 25残基(非対称単位中のユニット数を言う。アミノ酸残基ではない)を超えるポリマー, オリゴマーのデータは含まれない
- 非対称単位中に1000原子以上の場合には, Protein Data Bankに登録される
- CIFデータ自身へは, WebCSDを通じて全データにアクセスできるが, ライセンスが無いと各種機能は使えない
(<https://www.ccdc.cam.ac.uk/structures>)
- 本日は, ライセンスを購入してCSDのソフトを駆使しデータベース解析をする手法について講義があります

講習会・イベントスケジュール

[ホーム](#) > [講習会・イベントスケジュール](#) > [2025年](#) > [蛋白研/JAICI合同 CSD利用セミナー2025](#)

蛋白研/JAICI合同 CSD利用セミナー2025

2025年8月21日（木）

[Database](#)

ケンブリッジ結晶構造データベース(CSD)の利用セミナーを化学情報協会(JAICI)にて実施します。

CSD Portfolioでどのようなことができるか、一通りご説明します。また結晶構造をCSDに登録する際の注意点についても取り上げる予定です。現在、CSDをお使いの方も、これから利用を検討される方も参加可能です(アカデミック、企業共通)。

■ 開催概要

日時	2025年8月21日(木) 13:00 ～ 17:00
共催	大阪大学蛋白質研究所(蛋白研セミナー)、化学情報協会
後援	日本結晶学会
形式	対面とオンライン(ハイブリッド) → オンライン開催のみに変更になりました
参加費	無料
申込締切	2025年8月18日(月)
会場	化学情報協会 6階大会議室 ― および オンライン(ハイブリッド) → オンライン開催のみに変更になりました

講習会・イベントスケジュール

[2025年](#)

■ プログラム

時間	内容
13:00 ～	はじめに：栗栖 源嗣 (大阪大学 蛋白質研究所)
13:15 ～	CSD-Core: ConQuest + Mercury：大原 高志 (日本原子力研究開発機構)
13:45 ～	CSD-Core: Mercury [表示機能]：星野 学 (帝京大学)
14:00 ～	Deposit Structure + enCIFer：星野、大原
14:20 ～	(休憩)
14:35 ～	CSD-Core: IsoStar + Mogul：桜井 尋海 (化学情報協会)
15:05 ～	CSD-Materials：植草 秀裕 (東京科学大学)
15:55 ～	(休憩)
16:10 ～	CSD-Discovery：Rupesh Chikhale (CCDC)
17:00	終わりに

In 1972:



9th IUCr Congress in Kyoto, Japan

In 1978:



Institute for Protein Research founded the Crystallographic Research Center attached to the Institute. This Center started distributing the CSD and PDB data to the users in Japan **from 1978**.

CSDとCCDC

Cambridge Structural Database (CSD)は、ケンブリッジ大学構内にあるThe Cambridge Crystallographic Data Centre (CCDC)が1965年から作成している老舗の結晶構造データベース

1978年以降、蛋白研が日本の代表登録機関(National Affiliated Centre)に指定され、日本を代表してデータを購入して配布してきた

日本結晶学会誌 17, 295 (1975)



ケンブリッジ・結晶データファイルの現況

大崎 健次*

1. はじめに

ケンブリッジ大学の Crystallographic Data Centre で作られた有機化合物結晶構造のデータファイルについては、本誌にもすでに簡単な紹介がのせられたばかり、昨年秋の本学会年会（名古屋）や本年2月の理研シンポジウムでも話題として採り上げられたので、御承知の方も少なくないと思う。

もともとこのファイルは、特定研究「広域大量情報の高次処理」の「化学における情報処理」研究班（代表者 藤原鎮男教授）におけるテスト用のデータベースの1つとして、上記 Crystallographic Data Centre との契約の下に導入せられたもので、東京大学大型計算機センターにおける学術的利用などの条件がつけられている。東大計算センターにおいては、島内武彦教授のお世話で「結晶データベース開発研究会」が組織せられ、センター外からもこれに深い関心をもつ研究者を加えて、検索法やその他の利用方法の開発研究がすすめられ、近く同センター利用者に公開せられる見込みである。

日本結晶学会においても、このデータファイルには会員の多くが深い関心を持っているので、有志十数名が上記の研究会に参加し、主として利用者の立場から種々のテストや提案をおこなっている。また結晶学会内にも作業グループを作って、このファイルに関する経験やアイディアの交換をおこない、開発の促進をはかっている。

3. ケンブリッジ結晶データファイルのサービスの現状

現在このファイルは、大阪大学蛋白質研究所・結晶解析研究センターが窓口となって国費で導入され、同センターから4つの国立大学にあるサブセンターおよびそれに準ずる研究機関に磁気テープのコピーが配られて、それぞれの方式でサービスが行われている。また、民間の会社に属する研究機関などには、化学情報協会が仲介役となる別のルートが用意されている。

国立大学の大型計算機センターにあるサブセンターは、すべて大学間ネットワークにつながっているので、これらセンターの利用資格を持っている人なら、ネットワークを通して、希望するサブセンターのデータベースを利用することができる⁴⁾。サブセンターごとに利用方式が若干異なるのは、利用者からみれば不便であろうが、各大型計算機センターごとにセンターの運用方式に差があるのと、少しでも便利なシステムを提供したいとのサブセンターごとの研究開発の結果でもあるので、長い眼でみれば利益と考えて御了承くださるようお願いしたい。

- 大型ホスト計算機時代は、蛋白研がマスターファイルを購入し、CCDCとの契約の下で、各大学の計算機センターにコピーを配布し、リモートで検索するサービスを提供
- 1983年以降、営利企業は化学情報協会を通じて購入

CSDのライセンス形態

- 現在では、ライセンス管理と利用料集金とCCDCへの送金業務を阪大が責任を持って行なっている。キャンパスライセンスを研究室でシェアして購入されている大学もある。大阪大学でも2019年度から一部利用者に負担いただいている。
- 現在はアカデミック向けに複数のライセンス形態があり、蛋白質研究所が日本の代表登録機関としてライセンス管理を行っている(秘書: 冨田)
- 継続の特別ユーザーライセンス料(2025年度)

Researcherライセンス	(PC × 2 : 446,600円)
Groupライセンス	(PC × 6 : 668,800円)
Campusライセンス	(PC × 250 : 867,900円)
無制限ライセンス	(無制限 : 2,417,800円)

Academic
users

- ① 1st inquiry
 - ③ request a written estimate
 - ⑤ request an official order
 - ⑦ payment
- ② send the request form
- ④ send a written estimate
- ⑥ send the license letter from
CCDC by post and the invoice

NAC

IPR Osaka Univ.
Protein Research Foundation

⑧ wire transfer of the sum of license
fees

CCDC

Commercial
users

JAICI

⑧ wire transfer of the sum of license
fees

CCDC

CCDCが提供する無料のトレーニング

<https://www.ccdc.cam.ac.uk/community/training-and-learning/csdu-modules/>



Deposit Structures		Access Structures		Contact Us		Sign in	
Home	Software	Community	Discover	Consultancy Services	Research	Support and Resources	About

[CCDC](#) > [Scientific Community](#) > [Training and Learning](#) > On-demand CSDU modules

CSDU: On-Demand Learning



CSDU is 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.

Here you can learn about:

- The Cambridge Structural Database (CSD).
- How to use the CSD software and data to inform and advance your research.
- How cheminformatics and structural chemistry can be applied to problems in the discovery and development of new molecules and materials.

[Learn more about how our CSDU modules work in this blog.](#)

Upon completion of these modules, you will be awarded a certificate or LinkedIn badge certification to showcase your achievement.

Sign up for our Training, Education and Outreach newsletter

CCDCが提供する無料のトレーニング

<https://www.ccdc.cam.ac.uk/community/training-and-learning/csdu-modules/>

☰

YouTube^{JP}

🏠 ホーム

📺 ショート

📁 登録チャンネル

📺 ライブラリ

🕒 履歴

📺 作成した動画

🕒 後で見る

👍 高く評価した動画

登録チャンネル

📌 中央研究院Academ...

⊕ チャンネル一覧

探索

🔥 急上昇

🎵 音楽

🎬 映画と番組

📺 ライブ

🎮 ゲーム

📰 ニュース

検索

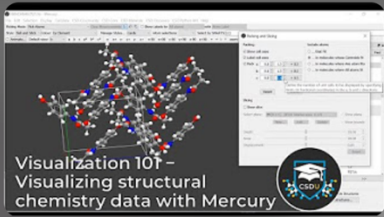
🔍

🎤

📺

🔔

👤



Visualization 101 - Visualizing structural chemistry data with Mercury

CSDU: Visualization 101 - Visualizing structural chemistry...

CCDCCambridge

3本の動画 710回視聴 最終更新日: 2023/01/10

🔍 🔄 ⋮

▶ **すべて再生** 🔄 **シャッフル**

Learn how to visualize crystal structures using CCDC's Mercury software in this CSDU (self-guided on-demand training) module "Visualization 101 - Visualizing structural chemistry data with Mercury". This playlist forms part of a short course that introduces scientists - crystallographers, chemists and cheminformaticians, among others, to visualizing chemical structures using Mercury and producing publication-ready images, through videos, demonstrations, guided tutorials, and a test that can be completed at the end to earn a certificate. After watching this video, continue your CSDU module by completing the U Try and U Test parts on our website to earn a completion certificate: <https://www.ccdc.cam.ac.uk/Community>

1



Welcome to CSDU

7:22

Welcome to CSDU, on-demand modules to learn how to use the CSD data and software for research

CCDCCambridge • 701 回視聴 • 10 か月前

2



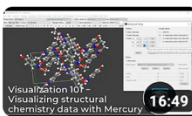
Visualization 101 - Visualizing structural chemistry data with Mercury

15:14

Introduction to CSDU module "Visualization 101 - Visualizing structural chemistry data with Mercury"

CCDCCambridge • 448 回視聴 • 3 か月前

3



Visualization 101 - Visualizing structural chemistry data with Mercury

16:49

Tutorial of CSDU module "Visualization 101 - Visualizing structural chemistry data with Mercury"

CCDCCambridge • 408 回視聴 • 3 か月前

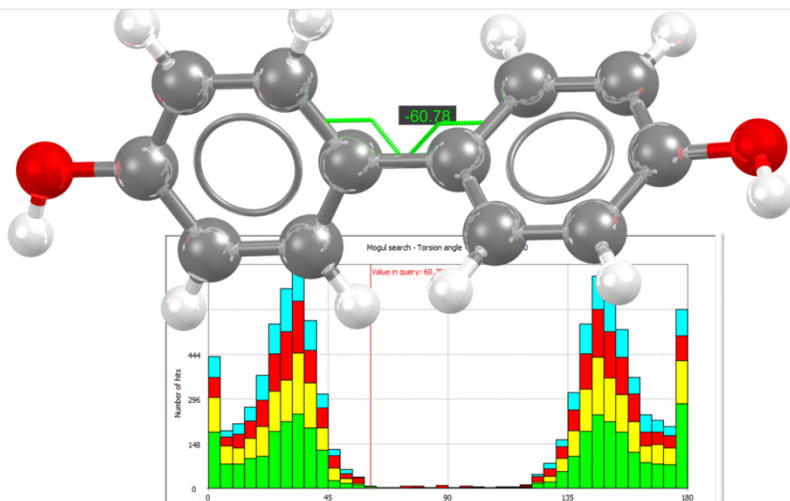
CCDCが提供する無料のトレーニング

<https://www.ccdc.cam.ac.uk/community/education-and-outreach/education/>

CCDC	Deposit Structures		Access Structures		Contact Us		My Account	
	Home	Solutions	Community	Discover	Consultancy Services	Research	Support and Resources	About

[CCDC](#) > [Scientific Community](#) > [Education and Outreach](#) > [Education](#)

Education



Teaching Materials for the Classroom

On this page, you can access more information on the Teaching subset, teaching modules that have been created for use in classrooms, and the Database of Educational Crystallographic Online Resources (DECOR); an online resource for the sharing, and borrowing of educational resources for crystallography.

[Sign up for our Training, Education and Outreach newsletter](#)

CSD Teaching subset

Our 750+ structure teaching subset includes a wide

Teaching modules

Access bite-sized modules for teaching structural

DECOR

An online resource for the sharing, and borrowing of