

## DEPARTAMENTO DE QUÍMICA INORGÁNICA

Tutorial sobre *Crystallographic Open Database*  
(Base de Datos de Química)  
<http://www.crystallography.net/cod/>

M<sup>a</sup> José Piernas Muñoz

Crystallography Open Database es una base de datos de carácter abierto que recoge información cristalográfica de casi medio millón de compuestos orgánicos, inorgánicos, metalorgánicos y minerales. Excluye polímeros.

Se accede a la base de datos a través del enlace <https://www.crystallography.net/cod/>. La página principal tiene el siguiente aspecto:

**COD** Crystallography Open Database

**COD Home**  
Home  
What's new?

**Accessing COD Data**  
Browse  
Search  
Search by structural formula

**Add Your Data**  
Deposit your data  
Manage depositions  
Manage/release prepublications

**Documentation**  
COD Wiki  
Obtaining COD License  
Querying COD  
Citing COD  
COD Mirrors  
Advice to donors  
Useful links

**COD**

Open-access collection of crystal structures of organic, inorganic, metal-organic compounds and minerals, excluding [biopolymers](#).  
Including data and [software](#) from [CrystalEye](#), developed by Nick Day at the [department of Chemistry](#), the University of Cambridge under supervision of [Peter Murray-Rust](#).  
All data on this site have been placed in the [public domain](#) by the contributors.

**News**  
2022-04-06 The Advisory Board of the Crystallography Open Database is intensely worried by the aggression of Russian armed forces in Ukraine. We condemn Putin's military invasion into Ukraine, earnestly support the fight of Ukrainian people for their freedom and call for immediate peaceful resolution of the conflict, respecting territorial integrity of all countries recognized by international treaties. [Read more](#)

Currently there are **487733** entries in the COD.  
Latest deposited structure: **3000384** on 2022-04-28 at 15:54:36 UTC

[CIF's Donators](#)

El menú de opciones aparece en el margen izquierdo (resaltado sobre fondo azul) de la página web y se compone de varias secciones:

- La página principal (**COD Home**) incluye una breve presentación del contenido de la base de datos, así como las novedades (**What's new?**) relacionadas con ella.
- Acceso a los datos de la COD (**Accessing COD Data**). Esta opción se abordará con más detenimiento.
- Añadir tus datos (**Add Your Data**). Esta opción permite añadir nuevos datos cristalográficos (únicamente ficheros "CIF") que ya estén publicados, pre-publicados o que se quieran ceder personalmente a la COD. El único requisito es haberse registrado o creado una cuenta en la COD ("**Sign up**", que aparece junto a "**Depositor begin**", tal y como aparece en la captura de imagen siguiente). También se pueden manejar los datos cristalográficos que uno ha depositado o aquellos que están a punto de publicarse.

**Validation and Deposition Interface**

Progress: Upload a file → Validate data → Deposit structures → Finish

**Depositor login** [sign up](#)

Choose deposition type: -- choose one --

Username:

Password: (forgot password?)

**About the Validation and Deposition Interface**

This interface allows you to upload, validate, edit and deposit CIF files.

**Steps**

The process of file deposition is pretty straightforward:

- **Upload.** The selected files are uploaded to the server;
- **Validation.** Our scripts perform various checks to see if all of the necessary data are present in the submitted files. If a file is found to be incorrect, it can be edited in the browser window and checked again. This step can be repeated as many times as needed;
- **Deposition.** The validated files can be deposited to COD. After a successful deposition COD numbers for the newly deposited structures will be displayed.

**File formats**

Currently we accept two types of files:

- Documentación adicional acerca de la COD (**Documentation: COD Wiki**, Obtener OCD (**Obtaining COD**), Licencia (**License**), etc.

Como se ha mencionado en uno de los puntos anteriores, la base de datos dispone de distintas formas para buscar la información cristalográfica. Este apartado se centrará en cómo obtener los datos de la COD.

**Accessing COD Data**

Browse

Search

Search by structural formula

formula

- Browse** → Navegar en una “revista de publicación” o “año de publicación” para buscar la estructura que se desea encontrar. Por ejemplo, al seleccionar una revista, automáticamente se accede a una lista de compuestos ordenados por nº identificación de la base de datos (COD ID). También permite clasificarlos según su fórmula, grupo espacial o volumen de celdilla, de mayor a menor complejidad o viceversa.
- Search (recomendado)** → Búsqueda:
  - Por nº de identificación de la base de datos (**COD ID**). Introduciendo el COD ID del compuesto de interés en el espacio habilitado para ello y clicando, a continuación, en “**Search**”.
  - Introduciendo lo que denomina “SMILES”, o lenguaje químico simplificado, cuyo código o notación se puede encontrar en el siguiente enlace: <https://www.daylight.com/dayhtml/doc/theory/theory.smiles.html>, y clicando en “**Search**”.
  - Rellenando uno o varios de los siguientes campos:

<b>text (1 or 2 words)</b>	<input type="text"/>
<b>journal</b>	<input type="text"/>
<b>year</b>	<input type="text"/>
<b>volume</b>	<input type="text"/>
<b>issue</b>	<input type="text"/>
<b>DOI</b>	<input type="text"/>
<b>Z (min, max)</b>	<input type="text"/> <input type="text"/>
<b>Z' (min, max)</b>	<input type="text"/> <input type="text"/>
<b>chemical formula (in Hill notation)</b>	<input type="text"/>
<b>1 to 8 elements</b>	<input type="text"/> <input type="text"/> <input type="text"/> <input type="text"/> <input type="text"/> <input type="text"/>
<b>NOT these elements</b>	<input type="text"/> <input type="text"/> <input type="text"/> <input type="text"/>
<b>volume min and max</b>	<input type="text"/> <input type="text"/>
<b>number of distinct elements min and max</b>	<input type="text"/> <input type="text"/>
<b>filters</b>	<input type="checkbox"/> has F <sub>obs</sub> <input type="checkbox"/> include <a href="#">duplicate entries</a> <input type="checkbox"/> include <a href="#">entries with errors</a> <input type="checkbox"/> include theoretical structures
<input type="button" value="Reset"/>	<input type="button" value="Send"/>

<b>a (min - max)</b>	<input type="text"/>	<input type="text"/>
<b>b</b>	<input type="text"/>	<input type="text"/>
<b>c</b>	<input type="text"/>	<input type="text"/>
<b>alpha</b>	<input type="text" value="90"/>	<input type="text" value="90"/>
<b>beta</b>	<input type="text" value="90"/>	<input type="text" value="90"/>
<b>gamma</b>	<input type="text" value="90"/>	<input type="text" value="90"/>
<b>filters</b>	<input type="checkbox"/> has F <sub>obs</sub> <input type="checkbox"/> include <a href="#">duplicate entries</a> <input type="checkbox"/> include <a href="#">entries with errors</a> <input type="checkbox"/> include theoretical structures	
<input type="button" value="Reset"/>	<input type="button" value="Send"/>	

y presionando en **Send**.

Por orden de aparición, los campos por los que se puede buscar un compuesto son: *texto* (1 o 2 palabras), *revista*, *año*, *volumen*, *edición*, *DOI*

de la revista en la que se publica la información de esa estructura,  $Z$ ,  $Z'$ , *fórmula química* (en notación Hill), *elementos que lo componen* (máximo 8; además se puede decidir que las búsquedas *no incluyan ciertos elementos*), *volumen máximo y mínimo*, etc., o por sus parámetros de celda ( $a$ ,  $b$ ,  $c$ ,  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$ ). Ejemplo: si se quiere buscar la estructura del sulfato de sodio, se ha de escribir “sodium” y “sulfate” en el apartado de texto y, después, pulsar “Send” (Send).

text (1 or 2 words)	sodium sulfate
journal	
year	
volume	
issue	
DOI	
$Z$ (min, max)	
$Z'$ (min, max)	
chemical formula (in Hill notation)	
1 to 8 elements	
NOT these elements	
volume min and max	
number of distinct elements min and max	
filters	<input type="checkbox"/> has $F_{obs}$ <input type="checkbox"/> include <a href="#">duplicate entries</a> <input type="checkbox"/> include <a href="#">entries with errors</a> <input type="checkbox"/> include theoretical structures
Reset	Send

Entre las 78 entradas que devuelve, se selecciona la que interesa. En este caso, serán la 4ª y la 12ª (recuadrados en rojo), que corresponden ambas a  $\text{Na}_2\text{SO}_4$ .

## Crystallography Open Database

### Search results

Result: there are 78 entries in the selection

[Switch to the old layout of the page](#)

Download all results as: [list of COD numbers](#) | [list of CIF URLs](#) | [data in CSV format](#) | [archive of CIF files \(ZIP\)](#)

Searching text, file, commonname, chemname, mineral contains sodium and sulfate

◀◀ First | ◀ Previous 20 | Page 1 of 4 | Next 20 ▶ | Last ▶▶ | Display 5 20 50 100 200 300 500 1000 entries per page

COD ID ▲	Links	Formula ▲	Space group ▲	Cell parameters	Cell volume ▲	Bibliography
<a href="#">1008026</a>	<a href="#">CIF</a>	H10 Na2 O8 S2	<a href="#">P 1 21/c 1</a>	5.9522; 21.618; 7.543 90; 103.804; 90	942.6	Lisensky, G C; Levy, H A Sodium thiosulfate pentahydrate: a redetermination by neutron diffraction <i>Acta Crystallographica B</i> (24, 1968-38, 1982), 1978, 34, 1975-1977
<a href="#">1008758</a>	<a href="#">CIF</a>	H20 Na2 O14 S	<a href="#">P 1 21/c 1</a>	11.512; 10.37; 12.847 90; 107.789; 90	1460.3	Levy, H. A.; Lisensky, G. C. Crystal structures of sodium sulfate decahydrate (Glauber's salt) and sodium tetraborate decahydrate (borax). Redetermination by neutron diffraction Locality: synthetic Note: anisoUs from ICSD <i>Acta Crystallographica, Section B</i> , 1978, 34, 3502-3510
<a href="#">1008812</a>	<a href="#">CIF</a>	B4 H20 Na2 O17	<a href="#">C 1 2/c 1</a>	11.885; 10.654; 12.206 90; 106.623; 90	1481	Levy, H. A.; Lisensky, G. C. Crystal structures of sodium sulfate decahydrate (Glauber's salt) and sodium tetraborate decahydrate (borax). Redetermination by neutron diffraction Locality: synthetic Note: anisoUs from ICSD <i>Acta Crystallographica, Section B</i> , 1978, 34, 3492-3499
<a href="#">1010522</a>	<a href="#">CIF</a>	Na2 O4 S	<a href="#">P b n n</a>	5.59; 8.93; 6.98 90; 90; 90	348.4	Frevel, L K The Crystal Structure of Sodium Sulfate III <i>Journal of Chemical Physics</i> , 1940, 8, 290-290

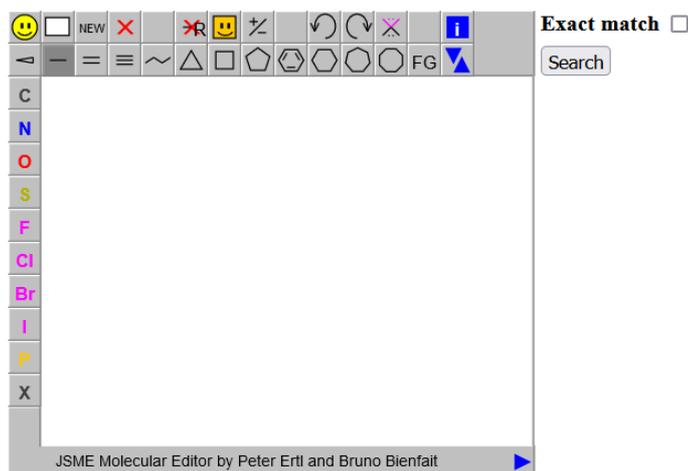
1010523	CIF	Na2 O3 S	P-3	5.441; 5.441; 6.133 90; 90; 120	157.2	<i>Journal of Chemical Physics</i> , 1940, 8, 290-290 Zachariasen, W H; Buckley, H E The Crystal Lattice of Anhydrous Sodium Sulphite. Na-2- S O-3- <i>Physical Review</i> (1.1893-137.1963/141.1966-188.1969), 1931, 37, 1295-1305
1010804	CIF	H4 Cu Na2 O10 S2	P 1 21/c 1	5.78; 12.58; 5.48 90; 108.5; 90	377.9	Palache, C Kroenkite and Natrochalcite from Chile. <i>American Journal of Science</i> (1939-), 1939, 237, 447-455
1010805	CIF	H6 Cu4 Na2 O20 S4		8.74; 6.15; 6.53 90; 118.7; 90	307.9	Palache, C Kroenkite and Natrochalcite from Chile. <i>American Journal of Science</i> (1939-), 1939, 237, 447-455
1010998	CIF	Al6 Na8 O28 S Si6	P-4 3 m	9.05; 9.05; 9.05 90; 90; 90	741.2	Barth, T F W The Structures of the Minerals of the Sodalite Family <i>Zeitschrift fuer Kristallographie, Kristallgeometrie, Kristallphysik, Kristallchemie</i> (-144.1977), 1932, 83, 405-414
1011019	CIF	K3 Na O8 S2	P-3 m 1	5.65; 5.65; 7.29 90; 90; 120	201.5	Gossner, B Ueber die Kristallstruktur von Glaserit und Kaliumsulfat. <i>Neues Jahrbuch fuer Mineralogie, Geologie und Palaeontologie, Beilage (-1925)</i> , 1928, 37, 89-116
1011158	CIF	C4 Mg2 Na6 O16 S	F d -3 m -1	13.93; 13.93; 13.93 90; 90; 90	2703	Shiba, H, Watanabe, T Les structures des cristaux de northupite, de northupite bromee et de tychite. <i>Comptes Rendus Hebdomadaires des Seances de l'Academie des Sciences (1884 - 1965)</i> , 1931, 193, 1421-1423
1011182	CIF	Cl F Na6 O8 S2	F m -3 m	10.15; 10.15; 10.15 90; 90; 90	1045.7	Watanabé, Tokunosuké The crystal structure of sulphohalite <i>Proceedings of the Imperial Academy (Tokyo)</i> , 1934, 10, 575-577
1011184	CIF	Na2 O4 S	F d d d -2	5.85; 12.29; 9.75 90; 90; 90	701	Zachariasen, W H; Ziegler, G E The crystal structure of anhydrous sodium sulfate Na2 S O4 <i>Zeitschrift fuer Kristallographie, Kristallgeometrie, Kristallphysik, Kristallchemie</i> (-144.1977), 1932, 81, 92-101
1011244	CIF	Al6 Ca2 Na6 O32 S2 Si6	P-4 3 n	9.1; 9.1; 9.1 90; 90; 90	753.6	Machatschki, F Kristallstruktur von Hauyn und Nosean <i>Zentralblatt fuer Mineralogie und Geologie, A</i> , 1934, 1934, 136-144
1100006	CIF	Al3.4 H42 Mg5.6 Na0.6 O37.3 S1.3	R-3 m -H	9.172; 9.172; 33.51 90; 90; 120	2441.4	Rius, J.; Plana, F. Contribution to the superstructure resolution of the double layer mineral motokoreite <i>Neues Jahrbuch fuer Mineralogie, Monatshefte</i> , 1986, 1986, 263-272

Para descargar los ficheros de información cristalográficos, simplemente se clicla en “CIF” para cada uno de los resultados elegidos.

Inconveniente. Desafortunadamente, esta base de datos no dispone de un visualizador de estructuras, por lo que se debe instalar previamente algún programa (por ejemplo, *Mercury*) que permita hacerlo.

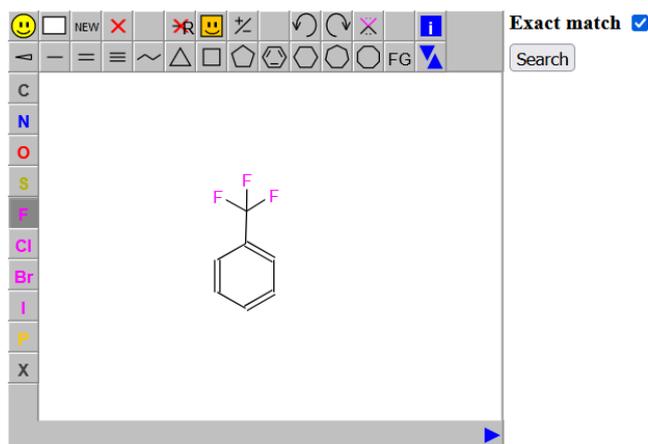
- c) **Search by structural formula** → Búsqueda por formula estructural. Si se elige esta opción, conduce a “**JSME search**”. Clicando en ella, surge la siguiente ventana de aplicación, que permite dibujar una estructura o un fragmento para buscar en la base de datos.

### Draw a structure or a fragment to search in the COD



Note: substructure search by SMARTS is currently available in a subset of the COD containing 214406 structures.

Por ejemplo, supongamos que se quiere buscar la estructura del trifluorometilbenceno. Solamente se ha de dibujar, seleccionar la opción “**Exact match**”, y darle a “**Search**”.



Al iniciar la búsqueda, aparecerá un mensaje similar al siguiente, indicando que está procesando la petición:



Y, finalmente, nos proporciona los resultados que encuentra:

**COD Crystallography Open Database**

**Search results**

Result: there are 1 entries in the selection

[Switch to the old layout of the page](#)

Download all results as: [list of COD numbers](#) | [list of CIF URLs](#) | [data in CSV format](#) | [archive of CIF files \(ZIP\)](#)

Searching SMILES like 'FC(F)(F)c1ccccc1'

◀ First | ◀ Previous 5 | Page 1 of 1 | Next 5 ▶ | Last ▶▶ | Display 5 20 50 100 200 300 500 1000 entries per page

COD ID ▲	Links	Formula ▲	Space group ▲	Cell parameters	Cell volume ▲	Bibliography
4510943	<a href="#">CIF</a>	C7H5F3	<a href="#">P b c a</a>	5.898; 14.913; 14.979 90; 90; 90	1317.5	Merz, Klaus; Evers, Mathies V.; Uhl, Felix; Zubatyuk, Roman I.; Shishkin, Oleg V. Role of CHF <sub>2</sub> - and CF <sub>3</sub> -Substituents on Molecular Arrangement in the Solid State: Experimental and Theoretical Crystal Structure Analysis of CH <sub>3</sub> CHF <sub>2</sub> CF <sub>3</sub> -Substituted Benzene <i>Crystal Growth &amp; Design</i> , 2014, <i>14</i> , 3124

◀ First | ◀ Previous 5 | Page 1 of 1 | Next 5 ▶ | Last ▶▶ | Display 5 20 50 100 200 300 500 1000 entries per page

[Back to the search form](#)  
Your own data is not in the COD? [Deposit it, thanks!](#)

[Top of the page](#) All data in the COD and the database itself are dedicated to the public domain and licensed under the [CCO License](#). Users of the data should acknowledge the original authors of the structural data.

En este caso, muestra un único resultado. De nuevo, se descarga el CIF.

Recuerda que también existe la posibilidad de que no arroje ningún resultado, si la base de datos no dispone de dicha estructura.

NOTA importante: el CIF se descarga con el COD ID como nombre, lo que facilita buscar posteriormente - si se quiere - la bibliografía asociada de la que se extrae dicho fichero (véase la *sección 3b, primer punto* de este tutorial).