

# Centro de Ensino Unificado de Brasília – CEUB

## Curso de Bacharelado em Ciência de Dados e *Machine Learning*

Introdução a R para Ciência de Dados  
Professor Dr. Wandré Nunes de Pinho Veloso

### Trabalho prático

#### Crystallography Open Database (COD)

##### 1- Estudar a biblioteca de compostos químicos:

- *Data de lançamento:* 05 de Março de 2003
- *Data da última versão:* 12/04/2022. Porém, todos os dias são adicionadas novas estruturas na base de dados.
- *Quem a mantém:* Foi desenvolvido por Nick Day, no departamento de Química da Universidade de Cambridge, sob a supervisão de Peter Murray-Rust. Os mesmos a mantém até o dia de hoje. Porém, todos os dados foram colocados em domínio público pelos colaboradores.
- *Objetivo da biblioteca de compostos:* O Crystallography Open Database (COD) é um banco de dados de estruturas cristalinas. Ao contrário de bancos de dados de cristalografia semelhantes, o banco de dados é totalmente de acesso aberto, com usuários registrados capazes de contribuir com estruturas publicadas e não publicadas de pequenas moléculas e cristais de células unitárias de tamanho pequeno a médio para o banco de dados. As estruturas 3D de compostos podem ser convertidas em arquivos de entrada para impressoras 3D.