

<https://www.scidb.cn/login>

注册登录的好处就是：  
可以设置一个与所内邮箱不一样的密码，并把密码分享给助手或学生。

**注册登录  
或者  
使用科技云账号（即化学所邮箱和密码）直接登录**

用户登录

邮箱账号

clone@iccas.ac.cn

密码

.....

登录

忘记密码

或使用



科技云



Github



ORCID



WeChat

验证码验证

**人机验证**



向右滑动

Fw: 落实我院《关于进一步加强和规范论文关联数据管理的通知》政策进行论文关联数据汇交通知

dh522@iccas.ac.cn 发送给 shaoman, 张荣国 包含 1 个附件

发件人: science@db <science@db@mic.cn>  
发送时间: 2022-09-07 17:17:48 (星期三)  
收件人: dh522@iccas.ac.cn  
抄送:  
主题: 落实我院《关于进一步加强和规范论文关联数据管理的通知》政策进行论文关联数据汇交通知



Make your research data citable, discoverable and persistently accessible.  
Satisfy flexible data sharing requirements.  
Dedicate to facilitating data dissemination and reusing.  
此邮件由 中国科学院化学研究所 管理员委托Science@DB平台发送给您

尊敬的投稿作者 Dong Huanli, 您好!

为进一步加强和规范期刊论文关联数据的汇交、管理与开放共享工作,根据《中国科学院关于印发〈中国科学院科学数据管理与开放共享办法(试行)〉的通知》(科发办字〔2019〕11号)和《中国科学院办公厅关于印发〈中国科学院科学数据工作要点〉的通知》(科办〔2020〕7号),院科学传播局于2021年6月17日,发布了《关于进一步加强和规范期刊论文关联数据管理的通

“院内科研人员在国内外出版的期刊上发表论文时,有论文关联数据的,须选择Science@DB进行数据汇交和首发……须在国内外数据有存储库中存储或发布论文关联数据时,须在论文发表前在Science@DB中进行备份存储或发布。院内科研人员在国内外出版的期刊上发表论文需汇交关联数据时,须选择Science@DB进行数据的汇交和发布。Science@DB须定期发布院属有关单位科研人员、科技

据此,我们邀您将此期发布在境外平台的 34 个论文关联数据,分别归档到Science@DB。

请您下载附件, 附件中包含需要归档的数据标题、数据DOI,以及每个数据的提交入口、预览地址、发布地址。

按照以下步骤,完成数据归档:

1、查看历史发布数据

您可通过“数据DOI号”,查看数据历史发布页面。

2、填写数据、保存数据

通过“数据提交入口”,进入数据提交页面,填写数据元数据信息,并上传数据文件,点击“保存”。

提示:请注意此页面填写的信息,需与第一步中的数据历史发布页面完全一致,包括数据标题、数据DOI、关键词、摘要、关联论文信息、数据许可协议、开放获取方式、数据文件(文件大小、文件个数)。若本地无此数据,可在第一步中,下载数据文件,再将文件上传至Science@DB。

3、提交数据

您可通过“预览地址”,浏览数据预览发布页面,查看信息填写是否无误,确认无误后,在第二步的数据提交页面,点击“提交”。

4、等待审核、发布

提交数据后,将由Science@DB数据审核团队审核(1-5个工作日)。若审核通过,Science@DB将同时发布您的数据,正式发布的链接,可通过“发布地址”访问,或登录Science@DB官网(<https://www.sci@db.cn>)检索;若未审核通过,将收到返修邮件,请您依据邮件完成数据修改,再次提交,直至审核通过。

如您有任何疑问,请联系我们:

机构管理员邮箱: s1ow@iccas.ac.cn 技术支持邮箱: science@db@mic.cn

关于科学数据银行(Science@DB)

科学数据银行(简称Science@DB)是一个公共的通用型科学数据存储库,主要面向科研人员、科研项目/团队、科研期刊、科研机构及高校等利益相关者,提供科学数据汇交、长期保存、出版、共享和开放获取服务,支持多种的数据获取与使用许可,在保障数据所有人权益的基础上,促进数据的可发现、可引用、可重用。Science@DB获得全球万余种学术期刊推荐使用,成为Springer平台可检索公开数据集300万个,用户遍布全球100余个国家和地区。

关于Science@DB的更多介绍,可查看官网(<https://www.sci@db.cn>)

版权所有©2015-2021 中国科学院计算机网络信息中心

京ICP备09112257-06

Huanli Dong

Institute of Chemistry, Chinese Academy of  
Zhongnancun North First Street 2, 100190 B

附件列表

待归档数据列表-dh522@iccas.ac.cn

下载 预览 保存到个人网盘

1/1

下载附件中的  
Excel表,并打开

打开附件的  
Excel表格

可通过“数据DOI号”，查看数据历史发布页面。（在海外平台发布过的数据），把上面的数据下载下来，然后上传到Sci DB。

通过“数据提交入口”，进入数据集提交页面，填写数据元数据信息，并上传数据文件，点击“保存”

A	B	C	待归并数据列表	E
序号	数据标题	数据Doi	数据提交入口	数据预览地址
1	: Experimental Crystal Structure	<a href="https://doi.org/10.5517/ccdc.csd.cc2007ny">https://doi.org/10.5517/ccdc.csd.cc2007ny</a>	<a href="db.cn/editLink/67bef5bfff8fa2b4eb0aaa5bf93dccb29?u=dhl5">db.cn/editLink/67bef5bfff8fa2b4eb0aaa5bf93dccb29?u=dhl5</a>	<a href="https://www.scidb.cn/s/144407">https://www.scidb.cn/s/144407</a>
2	: Experimental Crystal Structure	<a href="https://doi.org/10.5517/ccdc.csd.cc25qdv5">https://doi.org/10.5517/ccdc.csd.cc25qdv5</a>	<a href="db.cn/editLink/7a9d92116fe20851ab64becc47d3a2ab?u=dhl5">db.cn/editLink/7a9d92116fe20851ab64becc47d3a2ab?u=dhl5</a>	<a href="https://www.scidb.cn/s/130496">https://www.scidb.cn/s/130496</a>
3	: Experimental Crystal Structure	<a href="https://doi.org/10.5517/ccdc.csd.cc2307ky">https://doi.org/10.5517/ccdc.csd.cc2307ky</a>	<a href="db.cn/editLink/71a04cd6255531b34d7f364ab13b9dea?u=dhl5">db.cn/editLink/71a04cd6255531b34d7f364ab13b9dea?u=dhl5</a>	<a href="https://www.scidb.cn/s/312991">https://www.scidb.cn/s/312991</a>
4	: Experimental Crystal Structure	<a href="https://doi.org/10.5517/ccdc.csd.cc2307hw">https://doi.org/10.5517/ccdc.csd.cc2307hw</a>	<a href="db.cn/editLink/1071149d9524de7901a9f157956a982c?u=dhl5">db.cn/editLink/1071149d9524de7901a9f157956a982c?u=dhl5</a>	<a href="https://www.scidb.cn/s/132297">https://www.scidb.cn/s/132297</a>
5	: Experimental Crystal Structure	<a href="https://doi.org/10.5517/ccdc.csd.cc1zy68d">https://doi.org/10.5517/ccdc.csd.cc1zy68d</a>	<a href="db.cn/editLink/94a423c5611cd9a8f87843fd1aa62a11?u=dhl5">db.cn/editLink/94a423c5611cd9a8f87843fd1aa62a11?u=dhl5</a>	<a href="https://www.scidb.cn/s/142937">https://www.scidb.cn/s/142937</a>
6	: Experimental Crystal Structure	<a href="https://doi.org/10.5517/ccdc.csd.cc1zy69f">https://doi.org/10.5517/ccdc.csd.cc1zy69f</a>	<a href="db.cn/editLink/190d716be46ae2b1dd56a0571994f1d4?u=dhl5">db.cn/editLink/190d716be46ae2b1dd56a0571994f1d4?u=dhl5</a>	<a href="https://www.scidb.cn/s/143014">https://www.scidb.cn/s/143014</a>
7	: Experimental Crystal Structure	<a href="https://doi.org/10.5517/ccdc.csd.cc21trg3">https://doi.org/10.5517/ccdc.csd.cc21trg3</a>	<a href="db.cn/editLink/99f732a5f0b5ecd61de38ffad660f02d?u=dhl5">db.cn/editLink/99f732a5f0b5ecd61de38ffad660f02d?u=dhl5</a>	<a href="https://www.scidb.cn/s/130222">https://www.scidb.cn/s/130222</a>
8	: Experimental Crystal Structure	<a href="https://doi.org/10.5517/ccdc.csd.cc1zy67c">https://doi.org/10.5517/ccdc.csd.cc1zy67c</a>	<a href="db.cn/editLink/c1c74619904f5910048c2a660ed9ba17?u=dhl5">db.cn/editLink/c1c74619904f5910048c2a660ed9ba17?u=dhl5</a>	<a href="https://www.scidb.cn/s/142858">https://www.scidb.cn/s/142858</a>
9	: Experimental Crystal Structure	<a href="https://doi.org/10.5517/ccdc.csd.cc23mx4t">https://doi.org/10.5517/ccdc.csd.cc23mx4t</a>	<a href="db.cn/editLink/dbb50c2cef15bc4c709b8f6db09f5861?u=dhl5">db.cn/editLink/dbb50c2cef15bc4c709b8f6db09f5861?u=dhl5</a>	<a href="https://www.scidb.cn/s/132099">https://www.scidb.cn/s/132099</a>
10	: Experimental Crystal Structure	<a href="https://doi.org/10.5517/ccdc.csd.cc1mqqmp">https://doi.org/10.5517/ccdc.csd.cc1mqqmp</a>	<a href="db.cn/editLink/bcec5dcd9fc0045a348773de792c74e7?u=dhl5">db.cn/editLink/bcec5dcd9fc0045a348773de792c74e7?u=dhl5</a>	<a href="https://www.scidb.cn/s/138371">https://www.scidb.cn/s/138371</a>
11	: Experimental Crystal Structure	<a href="https://doi.org/10.5517/ccdc.csd.cc1pv71t">https://doi.org/10.5517/ccdc.csd.cc1pv71t</a>	<a href="db.cn/editLink/6193f838788870508d4304ffe6bb59a9?u=dhl5">db.cn/editLink/6193f838788870508d4304ffe6bb59a9?u=dhl5</a>	<a href="https://www.scidb.cn/s/143985">https://www.scidb.cn/s/143985</a>
12	: Experimental Crystal Structure	<a href="https://doi.org/10.5517/ccdc.csd.cc1lrw4">https://doi.org/10.5517/ccdc.csd.cc1lrw4</a>	<a href="db.cn/editLink/7138cd6f44c04259a792ad6d08659907?u=dhl5">db.cn/editLink/7138cd6f44c04259a792ad6d08659907?u=dhl5</a>	<a href="https://www.scidb.cn/s/136650">https://www.scidb.cn/s/136650</a>
13	: Experimental Crystal Structure	<a href="https://doi.org/10.5517/ccdc.csd.cc2307lz">https://doi.org/10.5517/ccdc.csd.cc2307lz</a>	<a href="db.cn/editLink/4e6ec328a07cefb5e59d3728ff68ffb6?u=dhl5">db.cn/editLink/4e6ec328a07cefb5e59d3728ff68ffb6?u=dhl5</a>	<a href="https://www.scidb.cn/s/313012">https://www.scidb.cn/s/313012</a>
14	: Experimental Crystal Structure	<a href="https://doi.org/10.5517/ccdc.csd.cc13qdnw">https://doi.org/10.5517/ccdc.csd.cc13qdnw</a>	<a href="db.cn/editLink/afa313db33e996482543a263c4ad4560?u=dhl5">db.cn/editLink/afa313db33e996482543a263c4ad4560?u=dhl5</a>	<a href="https://www.scidb.cn/s/138888">https://www.scidb.cn/s/138888</a>
15	: Experimental Crystal Structure	<a href="https://doi.org/10.5517/ccdc.csd.cc23y0cg">https://doi.org/10.5517/ccdc.csd.cc23y0cg</a>	<a href="db.cn/editLink/25168a6617df8a392b1ab4fdd858e56c?u=dhl5">db.cn/editLink/25168a6617df8a392b1ab4fdd858e56c?u=dhl5</a>	<a href="https://www.scidb.cn/s/137681">https://www.scidb.cn/s/137681</a>
16	: Experimental Crystal Structure	<a href="https://doi.org/10.5517/ccdc.csd.cc1lrz7">https://doi.org/10.5517/ccdc.csd.cc1lrz7</a>	<a href="db.cn/editLink/8e2816427542081293f4b070e2bf99a3?u=dhl5">db.cn/editLink/8e2816427542081293f4b070e2bf99a3?u=dhl5</a>	<a href="https://www.scidb.cn/s/137025">https://www.scidb.cn/s/137025</a>
17	: Experimental Crystal Structure	<a href="https://doi.org/10.5517/ccdc.csd.cc25qvnf">https://doi.org/10.5517/ccdc.csd.cc25qvnf</a>	<a href="db.cn/editLink/50c00888e89938cef6b6c1e436664e8b?u=dhl5">db.cn/editLink/50c00888e89938cef6b6c1e436664e8b?u=dhl5</a>	<a href="https://www.scidb.cn/s/131182">https://www.scidb.cn/s/131182</a>
18	: Experimental Crystal Structure	<a href="https://doi.org/10.5517/ccdc.csd.cc1lrxy6">https://doi.org/10.5517/ccdc.csd.cc1lrxy6</a>	<a href="db.cn/editLink/636c1d27d7144d78bacae7b47c417cf6?u=dhl5">db.cn/editLink/636c1d27d7144d78bacae7b47c417cf6?u=dhl5</a>	<a href="https://www.scidb.cn/s/136901">https://www.scidb.cn/s/136901</a>
19	: Experimental Crystal Structure	<a href="https://doi.org/10.5517/ccdc.csd.cc20kqgs">https://doi.org/10.5517/ccdc.csd.cc20kqgs</a>	<a href="db.cn/editLink/463cf549597352d922dde84ef4fb7d3b?u=dhl5">db.cn/editLink/463cf549597352d922dde84ef4fb7d3b?u=dhl5</a>	<a href="https://www.scidb.cn/s/138606">https://www.scidb.cn/s/138606</a>
20	: Experimental Crystal Structure	<a href="https://doi.org/10.5517/ccdc.csd.cc25d8yt">https://doi.org/10.5517/ccdc.csd.cc25d8yt</a>	<a href="db.cn/editLink/dd130e0f4e25946963a3b1af5c954e26?u=dhl5">db.cn/editLink/dd130e0f4e25946963a3b1af5c954e26?u=dhl5</a>	<a href="https://www.scidb.cn/s/132173">https://www.scidb.cn/s/132173</a>
21	: Experimental Crystal Structure	<a href="https://doi.org/10.5517/ccdc.csd.cc1kwty6">https://doi.org/10.5517/ccdc.csd.cc1kwty6</a>	<a href="db.cn/editLink/4c5e518699737af6298a8b8696b506cd?u=dhl5">db.cn/editLink/4c5e518699737af6298a8b8696b506cd?u=dhl5</a>	<a href="https://www.scidb.cn/s/142483">https://www.scidb.cn/s/142483</a>
22	: Experimental Crystal Structure	<a href="https://doi.org/10.5517/ccdc.csd.cc23632j">https://doi.org/10.5517/ccdc.csd.cc23632j</a>	<a href="db.cn/editLink/6fbc3a825f3eebe88b81bcfbc8c732a3?u=dhl5">db.cn/editLink/6fbc3a825f3eebe88b81bcfbc8c732a3?u=dhl5</a>	<a href="https://www.scidb.cn/s/131383">https://www.scidb.cn/s/131383</a>
23	: Experimental Crystal Structure	<a href="https://doi.org/10.5517/ccdc.csd.cc1zy6dj">https://doi.org/10.5517/ccdc.csd.cc1zy6dj</a>	<a href="db.cn/editLink/02b57d9493bd1293b8a9398069a88534?u=dhl5">db.cn/editLink/02b57d9493bd1293b8a9398069a88534?u=dhl5</a>	<a href="https://www.scidb.cn/s/143253">https://www.scidb.cn/s/143253</a>
24	: Experimental Crystal Structure	<a href="https://doi.org/10.5517/ccdc.csd.cc23mx2r">https://doi.org/10.5517/ccdc.csd.cc23mx2r</a>	<a href="db.cn/editLink/851b0cdfa5e5b12748ab92c35ca20066?u=dhl5">db.cn/editLink/851b0cdfa5e5b12748ab92c35ca20066?u=dhl5</a>	<a href="https://www.scidb.cn/s/131927">https://www.scidb.cn/s/131927</a>
25	: Experimental Crystal Structure	<a href="https://doi.org/10.5517/ccdc.csd.cc1zy6ch">https://doi.org/10.5517/ccdc.csd.cc1zy6ch</a>	<a href="db.cn/editLink/531dee8ab02dae7f9b5f03e06681bef2a?u=dhl5">db.cn/editLink/531dee8ab02dae7f9b5f03e06681bef2a?u=dhl5</a>	<a href="https://www.scidb.cn/s/143173">https://www.scidb.cn/s/143173</a>
26	: Experimental Crystal Structure	<a href="https://doi.org/10.5517/ccdc.csd.cc2307ds">https://doi.org/10.5517/ccdc.csd.cc2307ds</a>	<a href="db.cn/editLink/baa89cb049d6abbfbef8862a61b39e203?u=dhl5">db.cn/editLink/baa89cb049d6abbfbef8862a61b39e203?u=dhl5</a>	<a href="https://www.scidb.cn/s/132039">https://www.scidb.cn/s/132039</a>
27	: Experimental Crystal Structure	<a href="https://doi.org/10.5517/ccdc.csd.cc25qvmd">https://doi.org/10.5517/ccdc.csd.cc25qvmd</a>	<a href="db.cn/editLink/c4e76a2513c138e7f4df7191a2eeab98?u=dhl5">db.cn/editLink/c4e76a2513c138e7f4df7191a2eeab98?u=dhl5</a>	<a href="https://www.scidb.cn/s/131103">https://www.scidb.cn/s/131103</a>
28	: Experimental Crystal Structure	<a href="https://doi.org/10.5517/ccdc.csd.cc1zbd4">https://doi.org/10.5517/ccdc.csd.cc1zbd4</a>	<a href="db.cn/editLink/d33540964b822be05f1456840558a57f?u=dhl5">db.cn/editLink/d33540964b822be05f1456840558a57f?u=dhl5</a>	<a href="https://www.scidb.cn/s/142270">https://www.scidb.cn/s/142270</a>
29	: Experimental Crystal Structure	<a href="https://doi.org/10.5517/ccdc.csd.cc1kgrvm">https://doi.org/10.5517/ccdc.csd.cc1kgrvm</a>	<a href="db.cn/editLink/12d6798c748c26a419ff8df2d52edc6a?u=dhl5">db.cn/editLink/12d6798c748c26a419ff8df2d52edc6a?u=dhl5</a>	<a href="https://www.scidb.cn/s/143536">https://www.scidb.cn/s/143536</a>
30	: Experimental Crystal Structure	<a href="https://doi.org/10.5517/ccdc.csd.cc201gfv">https://doi.org/10.5517/ccdc.csd.cc201gfv</a>	<a href="db.cn/editLink/826dff51ec7d57496a36718833da776e?u=dhl5">db.cn/editLink/826dff51ec7d57496a36718833da776e?u=dhl5</a>	<a href="https://www.scidb.cn/s/132522">https://www.scidb.cn/s/132522</a>
31	: Experimental Crystal Structure	<a href="https://doi.org/10.5517/ccdc.csd.cc2991i8">https://doi.org/10.5517/ccdc.csd.cc2991i8</a>	<a href="db.cn/editLink/35652aa918d4dfc46357d776df2c095f?u=dhl5">db.cn/editLink/35652aa918d4dfc46357d776df2c095f?u=dhl5</a>	<a href="https://www.scidb.cn/s/315313">https://www.scidb.cn/s/315313</a>
32	: Experimental Crystal Structure	<a href="https://doi.org/10.5517/ccdc.csd.cc25d8xs">https://doi.org/10.5517/ccdc.csd.cc25d8xs</a>	<a href="db.cn/editLink/0f6c539d7e044f5841da512c3a262c11?u=dhl5">db.cn/editLink/0f6c539d7e044f5841da512c3a262c11?u=dhl5</a>	<a href="https://www.scidb.cn/s/132081">https://www.scidb.cn/s/132081</a>
33	: Experimental Crystal Structure	<a href="https://doi.org/10.5517/ccdc.csd.cc21blmm">https://doi.org/10.5517/ccdc.csd.cc21blmm</a>	<a href="db.cn/editLink/3d77d911b11e64f511b448188efdbd23?u=dhl5">db.cn/editLink/3d77d911b11e64f511b448188efdbd23?u=dhl5</a>	<a href="https://www.scidb.cn/s/131666">https://www.scidb.cn/s/131666</a>
34	: Experimental Crystal Structure	<a href="https://doi.org/10.5517/ccdc.csd.cc1zy6bg">https://doi.org/10.5517/ccdc.csd.cc1zy6bg</a>	<a href="db.cn/editLink/6f3b667c1d048f004249d83256656809?u=dhl5">db.cn/editLink/6f3b667c1d048f004249d83256656809?u=dhl5</a>	<a href="https://www.scidb.cn/s/143094">https://www.scidb.cn/s/143094</a>

点击“数据提交入口”的链接

[← 返回](#) | [编辑归档数据集](#)

1 数据集语言

中文  English

选择“English”

下一步

2 数据集描述信息

3 数据集作者信息

4 论文关联信息

5 数据相关信息

6 数据开放共享方式

7 数据集实体文件

保存草稿

提交审核

选择社区

数据集DOI  
10.5517/ccdc.csd.cc299118

数据集标题(必填)  
CCDC 2123859: Experimental Crystal Structure Determination

文件类型(选填)  
dataset

数据集关键词(必填)

填写必填项

数据集简介(必填)

**B I**   $x_2$   $x^2$

Related Article: Dan Liu, Xianxin Wu, Can Gao, Chenguang Li, Yingshuang Zheng, Yang Li, Ziyi Xie, Deyang Ji, Xinfeng Liu, Xiaotao Zhang, Liqiang Li, Qian Peng, Wenping Hu, Huanli Dong|2022|Angew.Chem.,Int.Ed.||doi:10.1002/anie.202200791,An entry from the Cambridge Structural Database, the world's repository for small molecule crystal structures. The entry contains experimental data from a crystal diffraction study. The deposited dataset for this entry is freely available from the CCDC and typically includes 3D coordinates, cell parameters, space group, experimental conditions and quality measures.,

学科分类(必填)

填写必填项

数据集封面(必填)



上传封面：  
能代表该论文的图片或者图表等。

上一步

下一步

1 数据集语言

2 数据集描述信息

3 数据集作者信息

4 论文关联信息

5 数据相关信息

6 数据开放共享方式

数据集文件的许可协议(必填)

开放获取

设置保护期,保护期后开放获取

\*保护期最长设定1年。保护期内,元数据可被公开访问,数据文件仅能通过私有链接下载。

上一步

下一步

7 数据集实体文件

保存草稿

提交审核

能够自动带出,如有错误可以修改

选择“开放获取”

6

## 数据开放共享方式

请选择许可协议

数据集文件的许可协议(必填)  
请选择许可协议(必填)

- CC0
- CC BY 4.0
- CC BY-SA 4.0
- CC BY-NC 4.0
- CC BY-NC-SA 4.0
- CC BY-ND 4.0
- CC BY-NC-ND 4.0**

如果不确定，可以选择这个。



李成赞

许可协议跟原数据集出版时保持一致



盖虹羽

我们团队的老师@CNIC张泽钰调研了CCDC平台，CCDC每个数据的详情页面确实未标明数据许可协议，建议作者依据个人需要选择。

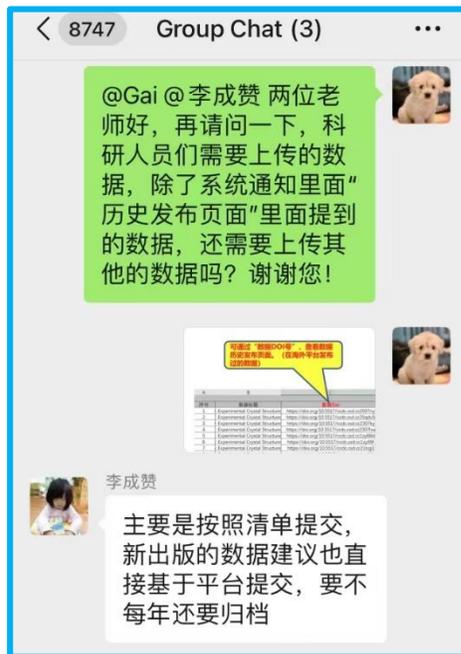
仅能通过私有链接下载。

上一步

下一步

关于CCDC相关数据

- 1 数据集语言
- 2 数据集描述信息
- 3 数据集作者信息
- 4 论文关联信息
- 5 数据相关信息
- 6 数据开放共享方式
- 7 数据集实体文件



把刚才下载的数据上传到Sci DB



请勿在数据集状态为“导入中”时上传数据  
单个文件超过4GB且数据总量小于1TB的数据集请使用FTP上传数据文件  
TB级数据集请联络服务人员 (sciencedb@cnic.cn)  
数据集文件超过2000个请联络服务人员 (sciencedb@cnic.cn)

