

<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

首页 [提交数据](#) dh\*\*\*2@iccas.ac.cn EN

**点击“我的数据”**

- 我的数据**
- 收藏列表
- 修改信息
- 修改密码
- 注销

ScienceDB

鼠标放在用户名的位置，会出现下拉菜单

# SCIENCE DATA BANK

Make your research data citable, discoverable and persistently accessible  
Satisfy flexible data sharing requirements  
Dedicate to facilitating data dissemination and reusing

输入关键字，作者，标题等

6,426,198

公开数据集

6,559,956

存储数据集

282,604 <sup>+GB</sup>

数据体量

4,461,619

数据集访问量

15,455,702

文件下载量

# 我的数据中心



我的数据集

相关期刊

| 标题 ▾   | 更新                           | 状态 ▾ | 类型 ▾        | 分享状态 ▾ | 查看                   | 操作        |
|--|------------------------------|------|-------------|--------|----------------------|-----------|
| CCDC 2123859: Experimental Crystal Structure Determination | 2022-06-30 18:59:33<br>GMT+8 | 草稿   |             |        | 私有访问链接<br>查看更多       | <b>编辑</b> |
| CCDC 1936650: Experimental Crystal Structure Determination | 2022-06-30 18:59:32<br>GMT+8 | 草稿   | 数据集/文件<br>集 | 开放获取   | 预览<br>私有访问链接<br>查看更多 | 编辑        |
| CCDC 1936649: Experimental Crystal Structure Determination | 2022-06-30 18:59:32<br>GMT+8 | 草稿   | 数据集/文件<br>集 | 开放获取   | 预览<br>私有访问链接<br>查看更多 | 编辑        |
| CCDC 1847279: Experimental Crystal Structure Determination | 2022-06-30 18:55:35<br>GMT+8 | 草稿   | 数据集/文件<br>集 | 开放获取   | 预览<br>私有访问链接<br>查看更多 | 编辑        |
| CCDC 1444161: Experimental Crystal Structure Determination | 2022-06-30 18:55:29<br>GMT+8 | 草稿   | 数据集/文件<br>集 | 开放获取   | 预览<br>私有访问链接<br>查看更多 | 编辑        |
| CCDC 1845318: Experimental Crystal Structure Determination | 2022-06-30 18:55:28<br>GMT+8 | 草稿   | 数据集/文件<br>集 | 开放获取   | 预览<br>私有访问链接<br>查看更多 | 编辑        |



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

**登陆: <https://dx.doi.org/>  
把曾经发布过的数据下载下来, 然后上传到Sci DB。**

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。

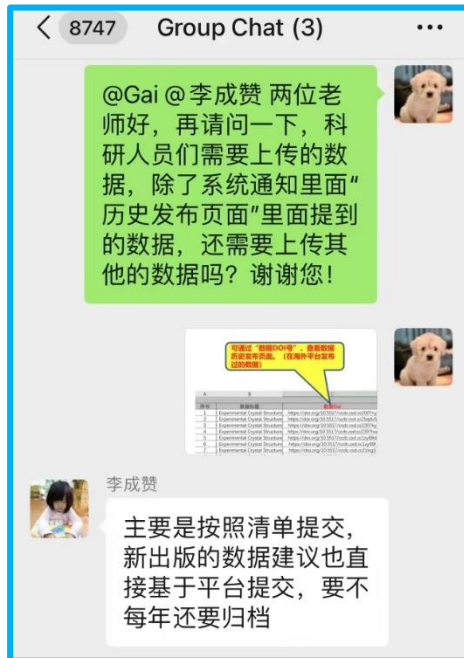
仅能通过私有链接下载。

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

HTTP FTP

您可以直接拖拽文件(文件夹)至此处 或者点击对应按钮上传

**上传文件** **上传文件夹**

**!** 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)

上传文件后, 请保存草稿进行文件关联, 然后文件信息将在此显示

刷新 获取全部链接

保存草稿

提交审核

上传数据后, 提交审核。