

초전도 재료물성 데이터베이스 개발

이 정 구, 이 상 호, 김 창 규, 김 지 영, 한 정 민, 김 태 중
한국과학기술정보연구원

Development of Superconducting Materials Property Database

Lee Jeong-gu, Lee Sang-Ho, Kim Chang-Kyoo,
Kim Ji-Young, Han Jeong-Min, Kim Tae-Jung
Korea Institute of Science and Technology Information
E-mail : jglee@kisti.re.kr

요 약

정보통신기술의 발전으로 과학기술정보의 다양화, 심층화, 고급화 요구가 증대되고 있으며, 미래 지향적 산업을 위한 과학기술정보기반 구축의 필요성이 날로 커지고 있다. 선진국들은 과학기술분야의 문헌데이터베이스 뿐만 아니라 물성데이터베이스도 개발하여 인터넷을 통해 서비스 하고 있다. 국내에서는 문헌데이터베이스의 구축 및 유통은 정착되어 가는 단계이나 물성데이터베이스에 대한 연구는 매우 미흡하다. 따라서 과학기술분야 정보기반 구축을 위해서도 물성데이터베이스 개발 및 연구가 절실히 필요하다.

본 연구에서는 미래 첨단산업분야인 초전도 재료물성 데이터베이스를 개발하였다. 초전도체 산화물의 열적, 기계적 특성 및 초전도 물성 등에 대한 데이터가 제공되며, 서지정보, 물질정보, 물성정보로 나누어 데이터베이스를 설계하였다.

Abstract

With the development of information communication technology, the demands for various, profound and advanced information on science and technology and the necessity for establishing science and technology information infrastructure with the aim of future oriented industry are ever increasing. Advanced countries are providing material property DB as well as bibliographic DB through the Internet. Establishment and dissemination of bibliographic DB at domestic is properly settled but research on material property DB is much to be desired. Accordingly, development and research on material property DB to construct the information infrastructure in science and technology are highly necessary.

In this study, we have developed superconducting materials property DB which is highly advanced industry field in future. We provide the thermal and mechanical, and superconducting property data for oxide superconductors, and the database is designed by bibliographic information, material information and material property information section.

I. 서론

데이터베이스는 단순한 정보의 저장소로서의 의미가 아닌 정보의 검색과 이용을 위한 기반으로써 정보화 사회의 핵심적인 부분을 차지하고 있다. 또한 생산되는 정보량이 증가하고 이를 이용하고자 하는 정보 요구가 다양해짐에 따라 정보를 효율적으로 관리하고 이용할 수 있는 데이터베이스의 구축도 높아지고 있는 추세이며 수많은 과학자 및 연구개발자들이 연구개발 활동을 위해 이러한 데이터베이스를 활용하고 있다.[1][5]

그러나 대부분의 연구개발자들이 재료 및 물질의 물성값이나 연구결과인 실험값을 활용하기 위해서는 주로 자료 검색을 통해 원문을 입수하여 그 내용을 파악하게 됨으로써 많은 시간과 비용으로 인해 연구효율을 저하시키는 부정적인 요인이 되고 있다.[8][9]

따라서 재료 및 물질의 물성 값이나 연구결과인 실험값을 수집하고 이를 분석·가공한 후 데이터베이스로 구축하여 웹을 통해 제공함으로써 연구개발에 따르는 비용과 시간을 경감시켜 연구효율을 크게 높일 수 있으며, 정보 공유를 통해 연구개발 활동을 촉진시킬 수 있다.[11][12]

본 연구에서는 첨단산업 분야인 초전도 재료 물성 데이터베이스를 개발하였다.

II. 본론

1. 초전도 재료물성 데이터베이스 개발

1.1. 초전도체

초전도체를 처음 발견한 사람은 물리학자 오네스(Onnes)이다. 그는 1908년 기체 헬륨을 압축하여 절대온도 4도(4K, 즉 -269°C)의 액체 헬륨을 만들어 내는데 성공하였다. 이 액체 헬륨을 이용하여 물질의 온도를 절대 0도에 가깝게 냉각시킬 수 있었다. 수은을 저온으로 냉각시키면서 전기저항을 측정하던 중 액체 헬륨의 기화 온도인 4.2K 근처에서 수은의 저항이 급격히 사라지는 것을 발견하였다. 이렇게 저항이 사라지는 물질을 초전도체라 부르게 되었다.[6] 초전도체는 직류전류에 대해 저항이 전혀 없는 완전도체이다. 따라서 초전도체로 된 고리에 전류를 흘려주면 초전도체를 따라

흐르는 초전류는 감쇠하지 않고 영원히 흐르게 된다. 또한 초전도체는 외부에서 자기장을 걸어주면 초전도체 내부의 자속밀도(B)가 0이 되는 완전 반자성체이다. 이러한 반자성 특성은 자기장을 초전도체 밖으로 밀어내는 효과로 나타나는데 이를 마이스너(Meissner)효과라고 부른다.[15] 초전도 현상은 초전도체 내의 자유전자들이 두 개씩 쌍을 이루으로써 생기는데, 이 전자쌍을 쿠퍼쌍이라고 부른다. 초전도체를 이루고 있는 격자 이온들의 진동이 전자의 움직임과 공명함으로써 쿠퍼쌍을 이루게 한다. 이때 이온 격자의 탄성이 초전도현상을 나타내는데 결정적인 역할을 하므로, 이온의 성질이나 이온들의 결합구조가 전자쌍을 이루는데 적합한 물질들만이 초전도체가 될 수 있다.[14] 초전도체는 3가지의 임계값(Critical Value)을 갖는다. 임계전류밀도(Critical Current Density), 임계자장(Critical Magnetic), 임계온도(Critical Temperature)가 그것이며, 초전도체는 이들 범위 안에 존재하여야만 그 성질을 유지할 수 있다.[7]

1.2. 초전도체 재료

초전도체를 재료의 특성으로 구분하면 금속 초전도체, 산화물 초전도체, 유기물 초전도체로 나눌 수 있다.[13]

1.2.1. 금속 초전도체

금속 초전도체는 다시 한가지 원소로만 된 원소 초전도체와 두 가지 이상의 화합물 및 혼합물로 된 화합물 및 혼합물 초전도체로 나누어진다. 주기율표상의 많은 금속 원소들이 저온에서 초전도체가 되는데 대표적인 원소 초전도체는 니오븀(Nb), 납(Pb), 주석(Sn), 알루미늄(Al) 등이 있다. 화합물 및 혼합물 초전도체로는 NbTi, NbN, Nb₃Sn, Nb₃Ge, NbGeAl, MgB₂ 등이 있다. 금속 초전도체의 특징은 임계온도가 낮으며, 금속성 때문에 초전도 특성을 결정하는 변수인 초전도 결맞음길이(superconducting coherence length)가 길어서 웬만한 불순물이나 결함에도 대체로 초전도성이 잘 약화되지 않는 점이다.

1.2.2. 산화물 초전도체

산화물 초전도체는 산화 금속 화합물들로서 1986년 La_{2-x}BaxCuO₄의 발견을 시작으로 하여 수십 종이 발견되었는데, 대표적인 것으로 YBa₂Cu₃O₇, Bi₂Sr₂Ca₁Cu₂O₈, HgBa₂Ca₂Cu₃O₈, BaKBiO₃ 등이 있다. 산화물 초전도체는 금속 초

전도체에 비해 임계온도가 월등히 높아 흔히 고온 초전도체로 불린다. 이들은 페로브스카이트(perovskite)구조를 바탕으로 한 복잡한 격자구조를 하고 있으며, 초전도 결맞음길이가 극히 짧아서 불문술이나 구조 결함에 대해 초전도 성질이 아주 민감하게 변한다.[7]

1.2.3. 유기물 초전도체

유기물 초전도체는 k-(BEDT-TTF)Cu[N(CN)₂]Br, (BETS)₂(Cl₂TCNQ), a-(BEDT-TTF)₂NH₄Hg(SCN)₄ 등 많은 종류가 있는데, 이들은 매우 복잡한 유기 화합물 구조를 하고 있으며, 임계온도가 매우 낮은 특성을 가지고 있다.

1.2.4. 초전도체의 응용분야

초전도체의 응용분야는 보통 응용 물질의 형태에 따라 선재 응용과 박막 응용으로 나눈다. 선재 응용에는 손실이 없는 송전선, 강한 자기장이나 아주 안정한 자기장을 발생시키는 초전도 자석, 에너지 저장장치, 모터, 발전기 등 많은 전류를 발생 또는 수송하는 전력계통 분야의 응용과 초전도 자기부상 열차. 초전도 추진선박 등 교통 분야의 응용 등이 있다. 박막 응용의 경우에는 박막의 저전류 손실 특성을 이용한 수동소자와 조셉슨 접합 등 초전도 접합을 이용한 능동소자가 있다. 수동소자에는 저손실 고주파 통신 등의 응용이 있고, 능동소자에는 지구자기장의 100억분의 1까지도 측정이 가능한 초전도 양자간섭장치를 이용한 뇌파나 심장 자기장을 측정하여 의료진단에 활용하는 생체자기 응용 초고속 디지털 소자 응용 등이 있다.[6]

1.3. 초전도 재료 재료물성 데이터베이스

초전도 재료물성 데이터베이스(Superconducting Material Property Database)는 초전도체 산화물의 열적, 기계적 특성 및 초전도 성질을 여러 가지 항목으로 나누어 서지정보 및 물질정보와 함께 물성정보로 구축하였으며 밀도, 결정구조와 같은 물리적 특성들은 수치데이터로 보여주고 있다. 이러한 물성 정보에는 상세공정, 화학조성, 측정조건 등이 포함되어 있으며, 이들 정보는 초전도 특성이 응용되고 있는 전력기기, 전자디바이스, 의료기기, 자기부상열차 등의 연구 및 기술개발에 있어서 기초적인 물성 데이터로 활용되고 있다.[7][10] 표 1은 초전도 재료의 몇 가지 물성 예를 나타낸 것이다.

표 1. 초전도 재료의 물성 예

번호	물성
1	Bulk Modulus
2	Coherence Length
3	Critical Current Density
4	Critical Temperature
5	Elasticity Tensor
6	Fracture Toughness
7	Hall Coefficient
8	Hardness
9	Magnetic Susceptibility
10	Surface Resistance

표 2는 초전도 재료물성 데이터베이스 개발 환경을 나타낸 것이다.

표 2. 초전도 재료물성 데이터베이스 개발환경

항목	환경
Language	Java, JSP, JDBC, Servlets, Javascript
DB	Oracle
Web Server	Tomcat, Apache
O·S	UNIX

2. 초전도 재료물성 데이터베이스 구성

초전도 재료물성 데이터베이스의 구성은 서지정보, 물질정보, 물성정보로 크게 나누어져 있다.

2.1. 서지정보

서지정보는 제목, 저자, 잡지명, 권, 호, 페이지, 발행년도, 편집자, 출판사, 언어, 특이사항, 색인어로 구성되어 있다.

2.2. 물질정보

물질정보는 화합물군 명칭, 비공식명칭, 화학식, 화학적 분류, 구조형태, 제조자, 상품명, 생산일자, 제품형태, 처리과정, 특이사항으로 구성되어 있다.

2.3. 물성정보

물성정보는 탄성텐서, 임계온도, 경도의 물성 항목으로 구성되어 있고, 초전도 재료의 물성을 측정하기 위한 측정방법 및 주의사항이 포함되어 있다. 그림 1은 초전도 재료물성 데이터베이스의 화면 전이도를 나타낸 것이다.

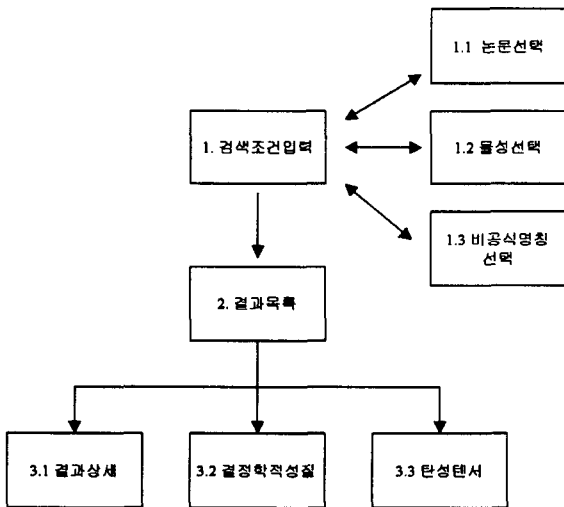


그림 5. 초전도 재료물성 데이터베이스 화면 전이도

3. 초전도 재료물성 데이터베이스 검색 설계

3.1 초전도 재료물성 DB 테이블 설계서

데이터베이스는 현실 세계에서 계속적으로 발생되는 사건과 현상을 컴퓨터 세계에서 표현하고 있다. 데이터 항목이란 현실세계의 사건과 현상을 구조적으로 표현하기 위해 사용되는 논리 단위이다. 데이터 항목은 데이터의 작성자로부터 데이터베이스 설계자, 데이터베이스 이용자까지 일관하여 사용하므로 누구나 다른 항목과 구별할 수 있도록 짧고 간결하며, 이해하기 쉽게 하여야 한다. 또한 데이터 항목마다 데이터 표현상의 특징, 데이터베이스의 제작 및 검색 과정상의 기술 등에 대한 데이터 항목을 정의해야 한다. 데이터 항목 선정과 정의된 결과는 설계에 관련된 여러 사람이 한눈에 쉽게 파악할 수 있도록 테이블의 형태로 작성하는 것이 바람직하다.[3][4] 그림 2는 초전도 재료물성 데이터베이스의 서지정보에 대한 테이블 설계서의 한 예이다.

데이터 설계서						
프로젝트	초전도 재료물성 DB구축	작성일자	2003. 3.10			
시스템명	초전도 DB	표시	2/17			
단기명	설계					
테이블명	tsw01a					
테이블설명	서지정보					
Row Size	200	테이블 크기	증가율/년			
필드명	필드설명	타입	길이	널허용	키구분	범위
pub_id	논문ID	Number	7	N	PK	
pub_code	논문코드	Number	7	N	FK	
title	제목	Varchar2	200	Y		
author	저자	Varchar2	100	Y		
volume	권	Varchar2	20	Y		
issue	호	Varchar2	20	Y		
year	발행년도	Varchar2	4	Y		
page	쪽수	Varchar2	20	Y		
editor	편집자	Varchar2	50	Y		
publisher	출판사	Varchar2	100	Y		
language	언어	Varchar2	20	Y		
notes	특이사항	Varchar2	2000	Y		
keywords	검색어	Varchar2	2000	Y		

그림 2. 초전도 재료물성 DB 테이블 설계서

3.2 초전도 재료물성 데이터베이스 E-R DIAGRAM

개체-관계 모델(Entity-Relationship Model)은 Peter Chen이 제안한 것으로 기본적으로 개체 타입(entity type)과 이들 간의 관계 타입(relationship type)을 이용해서 현실 세계를 개념적으로 표현하는 방법이다.[2]

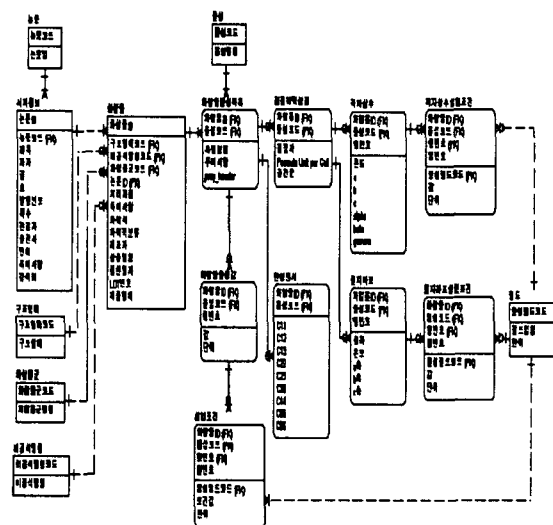


그림 3. 초전도 재료물성 DB의 E-R DIAGRAM

개체 관계 모델을 그래프 방식으로 표현한 것이 E-R 다이어그램이다. 그림 3은 초전도 재료물성 데이터베이스의 E-R DIAGRAM를 표현한 것이다.

3.3. 초전도 재료물성 데이터베이스 검색설계
 데이터베이스 검색 설계에 있어서 가장 중점적으로 고려된 부분은 해당 물성의 물성 값을 수치로 입력하여 검색되도록 한 것이다. 정보 이용자가 어떤 조건에서 특정 물성 값을 갖는 물질을 찾고자 할 경우 검색이 가능하도록 하였다는 점이다.

출처:

제목:

저자:

발행년도: [= >]

화학식:

화합물군:

비공식명칭:

구조형태:

물성:

물성값: [mΩ] ~ [mΩ]

그림 4. 초전도 재료물성 DB의 검색화면

그림 4는 초전도 재료물성 데이터베이스의 검색화면을 나타낸 것이다. 서지정보를 검색하고자 할 경우 논문제목과 저자를 키워드 방식으로 검색할 수 있도록 하였으며, 출처는 43개의 저널 종류 가운데 선택하여 검색할 수 있도록 하였다. 발행년도는 =, =<, >=, <, >의 조건을 주어 검색할 수 있도록 설계하였다. 물질정보 검색의 경우 화학식은 무기화합물의 화학식을 검색어로 입력하여 검색할 수 있도록 하였으며, 화합물군, 비공식 명칭, 구조 형태는 조회기능을 사용하여 그 가운데 필요한 항목을 선택하여 검색할 수 있도록 설계하였다. 물성정보 검색은 35개의 물성을 조회한 후 필요한 물성을 선택하여 검색할 수 있도록 하였으며, 필요에 따라 물성 값의 범위와 단위를 지정하여 검색할 수 있도록 설계하였다. 조회 기능을 사용하여 검색할 수 있는 항목의 종류를 표 3부터 표 6

까지 나타내었다.

표 3. 출처 종류(43종)

번호	종류
1	Acta Physica Polonica A
2	Advanced Energy Systems
3	Applied Superconductivity
...
41	Journal of Materials Science
42	Nature
43	Physical Review B

표 4. 화합물군 명칭(149군)

번호	명칭
1	Ba(K)-Bi-O
2	Ca-La(Ba)-Cu-O
3	Hg(Pb)-Ba-Ca-Cu-O
...
147	Yb:123
148	Yb:124
149	YW:121

표 5. 구조 형태(4개)

번호	형태
1	Mixed
2	Noncrystalline
3	Polycrystalline
4	Single Crystal

표 6. 물성 종류(35개)

번호	명칭
1	Bulk Modulus
2	Coherence Length
3	Critical Field Strength
...
33	Tensile Strength
34	Thermal Conductivity
35	Thermoelectric Power

정보이용자가 검색조건을 입력하여 그 조건을 만족하는 화합물들이 검색되면 그림 5와 같이 화학식 순으로 목록이 정렬되어 나타나게 된다.

No.	화학식	물성	물성값	논문명	년도
1	YBa ₂ Cu ₃ O _{7-x}	Critical Temperature	78	ASM International	1998
2	YBa ₂ Cu ₃ O _{7-x}	Critical Temperature	78	Journal of Solid State Chemistry	1996
3	YBa ₂ Cu ₃ O _{7-x}	Critical Temperature	79	Journal of Solid State Chemistry	1996
4	YBa ₂ Cu ₃ O _{7-x}	Critical Temperature	79	Journal of Solid State Chemistry	1996
5	YBa ₂ Cu ₃ O _{7-x}	Critical Temperature	82	Journal of Solid State Chemistry	1996
6	YBa ₂ Cu ₃ O _{7-x}	Critical Temperature	83	Journal of Solid State Chemistry	1996
7	YBa ₂ Cu ₃ O _{7-x}	Critical Temperature	85	Journal of Solid State Chemistry	1996
8	YBa ₂ Cu ₃ O _{7-x}	Critical Temperature	85	Journal of Solid State Chemistry	1997
9	YBa ₂ Cu ₃ O _{7-x}	Critical Temperature	90	Journal of Solid State Chemistry	1998
10	YBa ₂ Cu ₃ O _{7-x}	Critical Temperature	91	Journal of Solid State Chemistry	1999

이전 11 12 13 14 15 16 17 18 19 20 다음

그림 5. 초전도 재료물성 DB의 검색결과 화면

정렬된 목록에서 필요한 화합물의 번호나 항목을 선택하면 그림 6과 같이 그 화합물의 서지정보는 제목, 저자, 잠지명, 권, 호, 페이지, 발행년도, 편집자, 출판사, 언어, 특이사항, 검색어가 나타나도록 하였고, 물질정보는 화학식, 비공식 명칭, 화합물군, 화학적 분류, 구조형태, 제조자, 상품명, 생산일자, 로트번호, 제품형태, 특이사항이 나타나도록 하였으며, 그 다음 물성목록이 나타나도록 설계하였다.

Bibliographic Information 서지정보

Title: A Neutron Diffraction Study of the System Y_{1-x}Cu_xBa_{2-x}La_xO_{7-x}

Author(s): P.R. Stier and C. Greene

Publication: Superconductor Science and Technology Volume: 6 Issue: Not Available Year: 1992 Page(s): 205-209

Editor(s): Not Available

Publisher: IOP Publishing Ltd

Language: English

Status: Not Available

Keywords: Material Specification, Crystallography, Critical Temperature

Material Specification for Y:123; [Y(Cu)BaLa]Cu-O 물질정보

Process: Solid State Reaction

Notes: High-purity Y₂O₃, CeCO₃, BaCO₃, La₂O₃ and CuO were used to prepare... sample... The intimately ground powders were heated at 940 °C for 12 h in air, repressed, and reheated at 940 °C for 12 h in flowing oxygen, and slowly cooled (20 h) to ambient temperature.

Formula: Y_{1-x}Cu_xBa_{2-x}La_xO_{7-x}

Inferred Name: Y:123

Chemical Formula: Y(Cu)BaLaCuO

Chemical Class: Oxide

Structure Type: Polycrystalline

Material class: In House

Commercial Name: In House

Production Site:

Lot Number:

Production Form:

물성목록

- o Material Specification
- o Crystallography
- o Critical Temperature

그림 6. 데이터베이스의 검색결과 상세화면

물성목록 중에서 이용자가 필요한 물성을 선택하게 되면 그림 7과 같이 물성의 수치 테이블과 측정방법, 주의사항, 실험조건과 같은 물성의 상세정보가 나타나도록 설계하였다.

Total: 6 1/1page

No.	물성	논문제목	년도
1	SC Critical Temperature	Refinement of the Crystal Structure of SC YBa ₂ Cu ₃ O _{7-x}	1997
2	SC Critical Temperature	Values of Experiment	
3	SC Critical Temperature	Full Modules for diamond(C)	
4	SC Critical Temperature	Values of Experiment	
5	SC Critical Temperature	Measurement Meth	
6	SC Critical Temperature	Measurement Meth	

Values of Experiment

물성	단위	값	C ₁₁	C ₁₂	C ₁₃	C ₂₂	C ₂₃	C ₃₃	C ₄₄	C ₆₆	E ₁₁
mod	mod	mod									

Density for diamond(C)

Temperature	Density (g/cm ³)
298	3.5135

Measurement Meth

Typical density measured by Archimedes principle in water immersion. Archimedes principle in liquid nitrogen. Density measured by X-ray diffraction data.

Caution: Typical data distribution

Customs: Typical Data from our database displayed as .log

Property Info:

Full Modules: Crystallography, Micro-structure

Priority Information: Full Modules, Crystallography

그림 11. 초전도 DB의 물성정보 상세화면

III. 결론

본 연구에서는 산·학·연 관련 연구자들의 연구 활동 및 기술 개발을 촉진시키기 위해 미래 첨단 산업분야인 초전도 재료물성 데이터베이스를 개발하였다. 이를 통해 연구자마다 반복적으로 자료수집에 소요되는 불필요한 인력, 비용, 시간 등을 데이터베이스를 공유함으로써 경감시킬 수 있으며, 연구자의 연구 효율을 높일 수 있다. 또한 재료물성 정보에 대한 외국의 정보 의존성에서 탈피할 수 있는 기틀이 마련되었으며, 국가정보자원을 확보하는 계기가 되었다.

향후에는 해외의 관련 문헌과 핸드북 등으로부터 물성정보를 지속적으로 수집하고, 국내 고유정보를 개발하여 수록건수의 양을 늘리고, 연구자에게 가장 적합하도록 검색 기능도 추가할 예정이다. 또한 화합물 구조 정보와 연동한 검색시스템 개발에 대한 연구도 지속적으로 수행할 계획이다.

참 고 문 헌

- [1] 이석호, 데이터베이스론, 정익사, 2001
- [2] 박석, 데이터베이스 설계, 홍릉과학출판사, 1997
- [3] 박지환, 알고리즘과 데이터구조, 홍릉과학출판사, 1999
- [4] 데이터베이스 가이드, 산업기술정보원, 1993
- [5] 데이터베이스 구축 방법론, 데이터베이스진흥센터, 1998
- [6] 노광수, 초전도체 신소재, 한국과학기술원 신소재 사업단, 2001
- [7] 富木利雄, 高温超伝導 データブック, 丸善, 1988
- [8] 김익철, "材料强度特性 데이터베이스 構築", 정보관리연구, 제23권, 제1호, pp.1-21, 1992
- [9] 이철수, "물성 Database의 개발현황과 이용", 화학공업과 기술, 제16권, 제6호, pp.530-535, 1998
- [10] 春山富義, "超伝導磁石 システム 設計の ための データベース 構築", 低温工学, Vol.36, No.12, pp.671-674, 2001
- [11] Nagai, S. "物性 データベースと その 活用", 化学工学(JPN), Vol.59, No.4, pp.244-246, 1995
- [12] 飯島邦男, "物質・材料分野のファクトDB", 情報管理(JPN), Vol.41. No.10, pp.834-845, 1999
- [13] D. K. Finnemore, "Superconductivity Materials", Encyclopedia of Physics, pp.1190-1193, 1991
- [14] J. Bardeen, "Theory of Superconductivity" Physical Review, Vol.108, pp.1175-1204, 1957
- [15] Yasukage. ODA, "Meissner Effect and Resistivity of the Superconducting Y-Ba-Cu-O System" Japanese Journal of Applied Physics, Vol.26, No.5, pp.L608-L610, 1987