

다양한 무기결정구조데이터베이스(ICSD) 검색 시스템 개발

Development of Various Inorganic Crystal Structure Database Retrieval System

김지영, 이상호, 한정민*

한국과학기술정보연구원*

Kim Ji-Young, Lee Sang-Ho, Han Jeong-Min*

Korea Institute of Science and Technology
Information*

요약

한국과학기술정보연구원(KISTI)에서는 무기결정구조데이터베이스(ICSD, Inorganic Crystal Structure Database)를 국내 화학, 재료 관련 연구 개발자들에게 무료로 제공하고자 하였다. 그리하여 독일의 FIZ Karlsruhe로부터 ICSD의 국내 라이선스를 받아 이 데이터를 사용하여 데이터베이스를 구축하고 웹 기반의 새로운 정보 검색 시스템을 개발하였다.

웹상에서 여러 가지 방법으로 결정구조 정보를 검색 할 수 있는 다양한 메뉴를 구성하였으며 검색 결과에서는 결정구조에 관한 수치 정보 뿐 아니라 X-선 회절 패턴 및 3차원 결정구조 그래픽도 함께 제공하게 되었다.

이 시스템은 앞으로도 데이터의 지속적인 추가, 갱신이 이루어질 예정이며 연구자들이 편리하고 신속하게 정보를 제공받을 수 있도록 검색 시스템을 향상시켜 나갈 것이다.

Abstract

KISTI has intended to provide domestic researchers of chemistry and materials with the Inorganic Crystal Structure Database free of charge. Therefore, we construct the database and develop new web-based information searching system with the use of the ICSD data licensed by the FIZ Karlsruhe, Germany. We organize several menus possible to search the structure of crystal in a variety of ways on the web and the search results show not only numerical data of the structure of crystal but also the graphic of X-ray diffraction pattern and the 3-dimension structure of crystal. The data will be updated continuously and the searching system will be improved in order to provide researchers with information easily and swiftly.

I. 서론

X-선 회절 분석법은 일반적으로 고체 화합물에 들어 있는 원자들의 배열과 상호거리에 관한 지식을 비롯한 고체 물질들의 물리적 성질을 명확하게 이해하는데 많은 도움을 주고 있다.

또한, 임의의 시료가 어떠한 성분으로 구성되어 있는지 모를 경우, 이 시료에 X-선을 쬐어서 나타나는

회절 패턴(Diffraction Pattern)을 이미 알고 있는 시료에서 얻어진 회절패턴과 서로 비교하면 그 시료를 훼손하지 않고서도 성분을 알아낼 수 있다.

반도체 재료, 세라믹 재료 등의 무기 신소재 개발에 있어서 재료의 결정구조 해석, 격자결함 탐색, 결정성 분석 등의 기초 연구 활동이 필수적이거나 국내에는 이러한 연구를 지원할 정보가 부족한 상태이다. 특히

국내에는 재료의 구조분석을 위한 X-선 회절 분석 장치가 500여대 이상 보급되어 있으며 많은 연구자들이 이러한 신소재 개발에 참여하고 있으나 시료의 분석결과와 비교할 수 있도록 디지털 화되어 서비스되는 결정구조정보 데이터베이스가 없어서 연구에 어려움을 겪고 있는 실정이다.

ICSD(Inorganic Crystal Structure Database)는 1915년부터 현재까지 약 65,000여 개의 무기화합물에 대한 결정구조를 수록하고 있는 데이터베이스로 독일의 FIZ Karlsruhe에 의해 수집되고 유상으로 배포되고 있다. 한국과학기술정보연구원에서 ICSD 데이터에 대한 국내 서비스 라이선스를 획득함으로써 신소재, 신 재료 개발 분야의 국내 연구자들에게 무기결정구조를 제공할 수 있게 되었고 웹에서 검색이 가능한 검색시스템을 개발하였다.

본 연구는 ICSD 데이터를 확장하여 X-선 회절 패턴 데이터베이스를 구축하고 국내 연구자를 대상으로 무기결정구조정보와 함께 회절 패턴을 검색할 수 있게 하는 다양한 검색 시스템을 개발하여 이용자에게 편리한 웹 검색 서비스를 제공함으로써 신소재, 신 재료 개발 분야의 연구자들에게 연구시간과 노력을 단축시켜 연구 효율을 극대화할 수 있게 하며 더불어 신소재, 신 재료, 신 물질 개발을 지원할 수 있는 과학기술 정보 인프라를 구축하는데 이바지하고자 한다.

II. 본 론

기존의 웹상에서 구현된 ICSD 검색 프로그램의 기능을 향상시켰다. 여러 가지 검색 항목을 늘리고 그 검색 항목을 6개의 메뉴로 나누어 다양한 검색이 가능하도록 하였다.

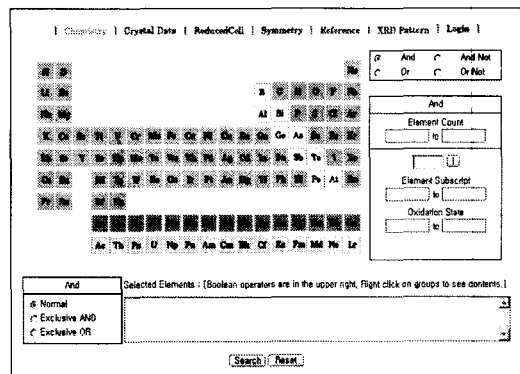
Chemistry, Crystal Data, Reduced Cell, Symmetry, Reference, XRD Pattern으로 구분되어 다양한 검색어를 입력하여 검색결과 목록을 열고, 목록에서 자세한 정보를 보고자 하는 화합물을 선택하

면 텍스트 형태로 된 결정학적 정보, 서지사항, 실험 조건 등을 확인할 수 있다. 또한 선택된 화합물에 대한 2D X-선 회절 패턴이미지 및 3차원 그래프를 볼 수 있다.

1. ICSD검색 메뉴

1.1 Chemistry 메뉴

Chemistry 메뉴에서는 화합물에 포함된 원소를 주기율표에서 선택하여 검색하는 방법과 원소들의 리스트를 알파벳순으로 보여주어 그 목록에서 원소 지정이 가능하도록 하는 두 가지 방법을 모두 구현하였다. 또한 원소간의 조합을 And, Or, And Not, Or Not, Exclusive And, Exclusive Or 중에서 지정하여 검색할 수 있도록 하여 다양한 검색요구를 충족시키도록 하였다. Element Count의 범위를 지정하여 검색할 수 있고 해당원소의 Element Subscript, Oxidation State 범위를 지정하여 검색할 수도 있다.



▶▶ 그림 1. ICSD 검색 시스템 Chemistry 메뉴

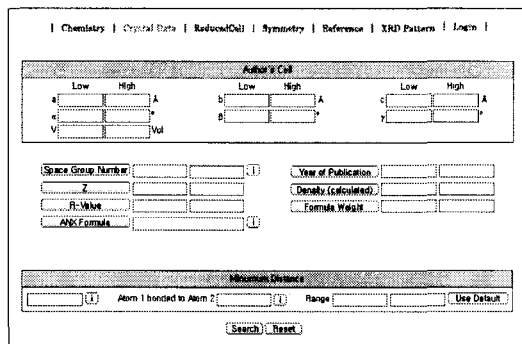
1.2 Crystal Data 메뉴

Crystal Data 메뉴에서는 Author's Cell의 cell parameter(a, b, c, α , β , γ) 및 cell volume(V)값의 범위(최저값, 최고값)를 지정하여 검색할 수 있다. 이와 함께 Space Group Number를 지정하여 검색하고자 할 경우 사용자가 숫자를 Key-in하는 방식과 버튼을 클릭하여 보여지는 Space Group 목록 중 하

나를 선택하여 자동으로 Space Group Number가 입력되는 방식 모두 가능하다.

Year of Publication, Z값, R값, Density (calculated), Formula Weight의 범위를 지정하여 검색할 수도 있다. ANX Formula를 직접 입력하거나 목록 중 하나를 선택하여 검색할 수 있도록 하였다.

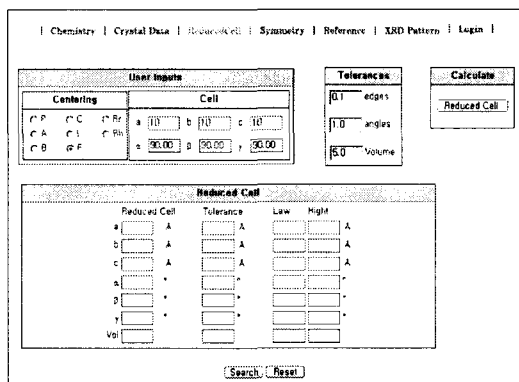
또한 Minimum Distance를 지정하여 검색할 수 있도록 하였다. 이때 원소1과 원소2를 리스트에서 선택할 수 있도록 하고 사용자가 원하는 distance range를 숫자로 key-in하거나 default값을 선택할 수도 있도록 구현하였다. 이 메뉴화면에서 선택되는 여러 가지 검색 항목은 And 조합으로 검색식이 이루어진다.



▶▶ 그림 2. ICSD 검색 시스템 Crystal Data 메뉴

1.3 Reduced Cell 메뉴

Reduced Cell 메뉴에서는 결정축계(P, C, I, F, A, B, Rr, Rh)를 선택할 수 있도록 하고 셀 파라미터를 직접 입력하며 Tolerance도 원하는 값으로 입력하여 검색이 가능하도록 하였다.

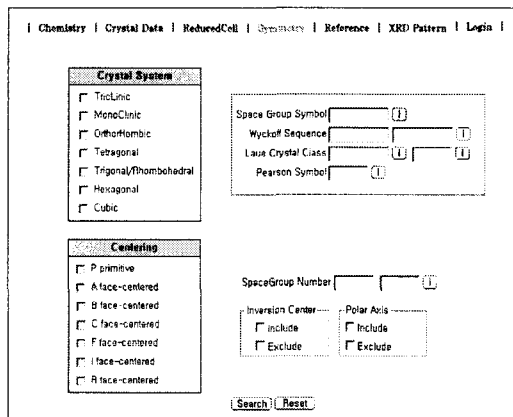


▶▶ 그림 3. ICSD 검색 시스템 Reduced Cell 메뉴

1.4 Symmetry 메뉴

Symmetry 메뉴에서는 결정계(Triclinic, Monoclinic, Orthorhombic, Tetragonal, Trigonal/Rhombohedral, Hexagonal, Cubic)와 결정축계(P, A, B, C, F, I, R)를 선택하여 검색할 수 있도록 하였고, Space group symbol, Wyckoff Sequence, Laue/Crystal Class, Pearson Symbol 중 하나를 지정하여 원하는 공간군을 선택하여 검색할 수 있도록 하였다. 이때 Wyckoff Sequence, Laue/Crystal Class는 두 단계를 거쳐 선택하도록 하였다.

Inversion Center의 Include, Exclude 여부를 선택할 수 있고, Polar Axis의 Include, Exclude 여부를 선택하여 검색할 수 있도록 하였다.



▶▶ 그림 4. ICSD 검색 시스템 Symmetry 메뉴

1.5 Reference 메뉴

Reference 메뉴에서는 Year of Publication 항목에서 검색을 원하는 데이터의 출판연도를 입력하여 검색할 수 있고, Page Number 항목에서 수록논문 페이지를 입력하여 검색할 수 있도록 하였다. Collection Code를 입력하여 검색할 수도 있다. Recording Date와 Modification Date는 열거되는 목록 중 하나를 선택하여 검색할 수 있다.

Journal Coden/Title 목록 중 하나를 선택하여 검색할 수 있고 Mineral name, Mineral group, STD Remarks/Description도 목록 중 하나를 선택하여 검색할 수 있다.

저자명(Authors), 화합물명(Chemical Name), 화학구조식(Structured Formula), 논문기사제목(Title of Publication), 추가 특이사항(Additional Remarks), Comments, Wyckoff Sequence, Pearson Symbol을 입력하여 검색할 수 있도록 하였다. 이 때 문자열에 '*'를 쓰면 와일드카드로, '?'를 쓰면 하나의 문자로 인식하여 검색을 수행한다.

이 메뉴화면에서 선택되는 여러 가지 검색 항목은 And 조합으로 검색식이 이루어진다.

▶▶ 그림 5. ICSD 검색 시스템 Reference 메뉴

1.6 XRD Pattern 메뉴

XRD Pattern 메뉴에서는 X-선 회절 패턴 주요 피크의 2-theta를 5개까지 사용자가 입력하여 패턴검

색을 할 수 있다. X-선 회절장치 마다 교정 오차를 고려하여 사용자가 입력한 2-theta값에 대하여 ± 0.5 내의 피크를 포함시키도록 하였다. 패턴 검색을 위해서 화합물의 X-선 회절 패턴의 주요 피크를 발췌하여 색인을 구축하였다.

▶▶ 그림 6. ICSD 검색 시스템 XRD Pattern 메뉴

2. 검색 결과 목록

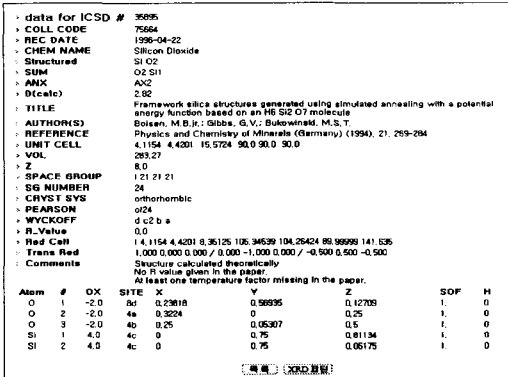
검색 결과 목록 화면은 한 페이지 당 15개의 검색 결과를 보여주도록 하였으며 화학식, Z값, Space group symbol, a, b, c, α , β , γ 값을 함께 보여주도록 설계하였다. 이 중 상세결과를 보고자 하는 화합물의 화학식(Formula) 클릭하면 상세결과 화면을 볼 수 있다.

No.	Formula	Z	SGR	a	b	c	Alpha	Beta	Gamma
1	BaTiNb2O12	4.0	CmCm	5.700(1)	5.361(1)	11.33(2)	90	90	90
2	Ba1Nb1S2	2.0	P4/mmm	4.430(1)	4.430(1)	6.89(2)	90	90	90
3	Ba3Nb1O9S6	2.0	P63mc	5.878(1)	5.878(1)	14.35(4)	90	90	120
4	Ba2Fe10Nb1O22S6	1.0	P3-1	5.936(1)	5.936(1)	14.35(4)	90	90	120
5	Ba2Fe10Nb1O22S6	1.0	P3-1	5.916(1)	5.916(1)	28.36(2)	90	90	120
6	Ba2Fe10Nb1O22S6	1.0	P3-1	5.921(1)	5.921(1)	28.61(2)	90	90	120
7	Ba1Nb1O9S6	2.0	R3m	3.908(1)	3.908(1)	11.500(2)	90	90	90
8	Ba1Nb1O9S6	2.0	R3m	3.908(1)	3.908(1)	11.500(2)	90	90	90
9	Ba1Nb1O9S6	4.0	Cmca	12.146(2)	10.880(2)	9.834(5)	90	90	90
10	Ba1Nb1O9S6	1.0	P63/m	10.395(3)	10.395(3)	10.395(3)	90	90	90
11	Ba3Nb1O9S6	2.0	P63/mmc	5.765(3)	5.765(3)	14.22(4)	90	90	120
12	Ba1Nb1O9S6	2.0	P121/m	5.878(1)	5.878(1)	8.06(4)	90	90	90
13	Ba5Nb2O9S4S2V2	8.0	R1AC2	12.234(2)	12.234(2)	8.28(1)	90	90	90
14	Ba5Nb2O9S4S2V2	1.0	P63/m	10.959(2)	10.959(2)	9.83(4)	90	90	90
15	Ba1Nb1O9S6	4.0	Cmca	12.146(2)	10.880(2)	9.834(5)	90	90	90

▶▶ 그림 7. ICSD 검색 결과목록 화면

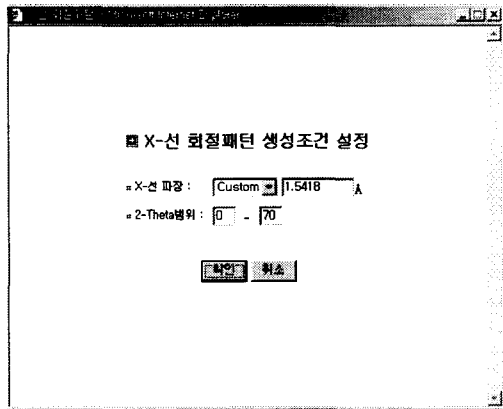
3. 검색 결과 상세내용

검색 결과 상세 화면에서는 서지사항, 화합물 정보, 구조 정보가 모두 나온다.



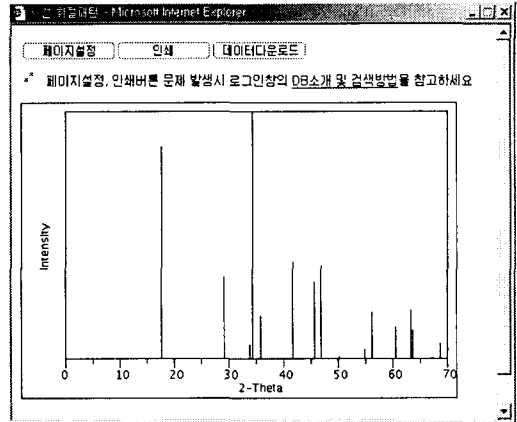
▶▶ 그림 8. ICSD 검색 결과 상세 화면

미지를 볼 수 있기에서 XRD 패턴을 보고자 할 경우 “XRD 패턴” 버튼을 클릭하면 아래의 그림 9와 같이 X-선 회절패턴 생성조건을 설정하고 확인버튼을 누르면 패턴을 그림10의 화면에서와 같이 볼 수 있다.



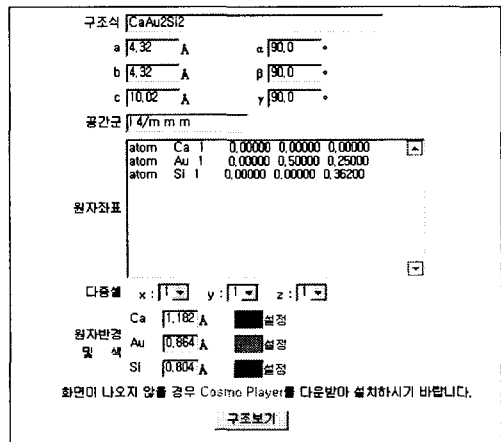
▶▶ 그림 9. ICSD 생성조건 설정 화면

또한 찾은 패턴을 인쇄하거나 저장, 데이터를 다운로드 할 수 있다.



▶▶ 그림 10. ICSD Peak보기 화면

3차원상의 결정구조 그래픽을 보고자 할 경우 “VRML 보기” 버튼을 클릭하면 아래의 그림11과 같이 간략한 구조정보가 제시되며 이용자가 원하는 색으로 원자 색을 변경할 수 있고 다중 셀의 크기를 지정할 수 있으며 Cosmo player를 통해 그림 12처럼 3차원상의 결정구조를 볼 수 있고 회전 및 확대, 축소가 가능하다.



▶▶ 그림 11. 3차원상의 결정구조 설정화면

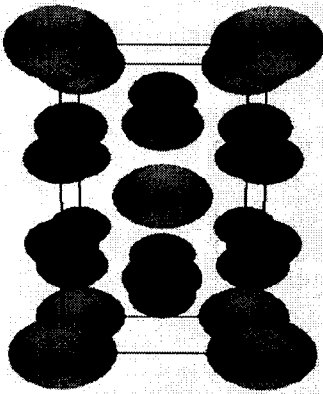


그림 12. 3차원 결정구조 화면

III. 결론

한국과학기술정보연구원(KISTI)에서는 독일의 FIZ Karlsruhe에서 라이선스를 얻은 무기결정구조정보(ICSD)의 다양한 검색 시스템을 개발하여 국내 연구자를 대상으로 웹에서 검색이 가능하도록 하였으며 무기결정구조정보 및 X-선 회절 패턴 이미지를 제공하고 VRML로 3차원 결정구조를 볼 수 있는 시스템을 개발하였다. 검색 항목을 6개의 메뉴로 나누어 각 메뉴별로 다양한 검색이 가능하도록 검색 기능을 향상시켰다. 이 서비스는 독일과의 계약 조건에 의해 국내 연구자에게만 서비스되도록 한정되어 있다. 이 시스템은 앞으로도 데이터의 지속적인 추가, 갱신이 이루어질 예정이며 연구자들이 편리하고 신속하게 정보를 제공받을 수 있도록 검색 시스템을 향상시켜 나갈 것이다.

■ 참고문헌 ■

- [1] 참조표준정보 이용에 관한 조사, KISTI, 2001
- [2] James A. Kaduk, "Use of the Inorganic Crystal Structure Database as a problem solving tool", *Acta Cryst. B* 58, 370-379 (2002)
- [3] Ekkehard Fluck, "Inorganic Crystal Structure Database(ICSD) and Standardized Data and Crystal Chemical Characterization of Inorganic Structure Types (TYPIX)- Two Tools for Inorganic Chemists and Crystallographers", *J. Res. Inst. Stand. Technol.* Vol. 101, No. 3, 217 (1996)
- [4] Alec Belsky, Mariette Hellenbrandt, Vicky Lynn Karen, Peter Luksch, "New developments in the Inorganic Crystal Structure Database (ICSD) : accessibility in support of materials research and design", *Acta Cryst. B* 58, 364-369(2002)
- [5] "Data Import and Validation in the Inorganic Crystal Structure Database", *J. Res. Inst. Stand. Technol.* Vol. 101, 365(1996)
- [6] 참조표준정보 DB 구축 사업 보고서, KISTI, 2002.
- [7] FIZ Karlsruhe 웹사이트, <http://w>