

무기결정구조 데이터베이스 검색 시스템 개발

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

Development of Inorganic Crystal Structure Database Retrieval System

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

요 약

화학분야 정보 중 무기재료 합성 및 물성 연구에 필수적으로 사용되는 무기결정구조 데이터베이스를 구축하였다. 또한 국내 연구자들이 무기결정구조 정보를 웹에서 손쉽게 검색할 수 있는 웹 검색 시스템을 개발하였다. 데이터 소스는 독일의 FIZ-Karlsruhe에 의해 수집된 1915년부터의 데이터 약 65,000건을 확보하였으며 빠르고 효율적인 화합물 검색이 가능하도록 데이터베이스를 설계, 검색 시스템을 개발하였고 특히 결정구조에 대한 수치검색이 가능하도록 개발하였다.

Abstract

Inorganic Crystal Structure Database, the essential information in the chemistry field for synthesis and property research of inorganic materials, has been constructed. The data source is obtained from the FIZ-Karlsruhe, about 65,000 records of the coverage period is 1915 year to present. This paper describes the database schema and retrieval system of the Inorganic Crystal Structure Database designed for the speedy and efficient retrieval, especially developed into supporting numeric retrieval of the crystal structure cell parameter.

I. 서론

과학기술 분야의 연구자들에게 유용한 데이터베이스를 구축하는 데 있어 산·학·연에서 그 필요성은 증대되고 있으나 네트워크가 형성되어 있지 않은 상태에서는 정보 수집이 어렵거나, 수집된 정보의 가공에 많은 전문 인력이 필요한 경우, 또한 어느 정도 규모의 축적량이 달성될 때까지 무

준한 정보축적 활동이 있어야 하는 데이터베이스 구축에 관해서는 국가차원에서 데이터베이스 구축을 주도하여 연구자들에게 필요한 정보를 지원하는 역할이 필요하다.

이에 한국과학기술정보연구원(KISTI)에서는 21세기 고부가가치 산업 중 하나인 재료분야 연구를 지원하기 위한 데이터베이스 구축에 중점을 두고 관련 데이터베이스의 국내외 현황 조사 및 수요파

악[1]을 통해 무기결정구조 데이터베이스를 구축하였다. 여기에 무기결정구조 데이터베이스 설계 및 검색 시스템 개발에 관한 내용을 소개하였다.

II. 본론

1. 무기결정구조 데이터베이스 소개

재료의 물성은 결정구조에 지대한 영향을 받는다. 따라서 물리적, 화학적, 전기적, 자기적, 광학적 성질 등을 예측하기 위해서는 그 재료의 결정구조를 밝히는 것이 매우 중요하다. 오늘날 대부분의 연구실에서는 고체 물질의 구조 및 성질을 밝히는 데 있어 XRD(X-Ray Diffraction)를 이용하고 있으며, 그 이용률이 계속적으로 증대되고 있다. XRD 실험결과를 해석하여 얻어지는 결정구조 정보는 각 물질마다 고유하기 때문에 어떤 물질을 합성했을 경우, 문헌에서 기존의 결정구조 정보를 찾아 비교하는 과정은 필수불가결하다. 따라서 결정구조 데이터들이 축적되어 데이터베이스로 구축되어 있으면 재료 디자인, 물성 예측, 화합물 확인 등과 관련한 정보를 찾아 비교하는 과정에서 시간과 비용을 절감해주는 효과가 있을 뿐만 아니라 여러 응용연구를 가능하게 한다는 면에서 그 의의가 크다고 할 수 있다.[2][3]

또한 결정구조 데이터를 검색하는 것은 화학산업(catalytic materials), 석유산업(zeolites), 전자산업(epitaxial growth and thin films) 등의 연구 및 응용에 있어 문제를 해결하는 주요한 과정이 되고 있다. 따라서 믿을만한 결정구조 정보를 검색할 수 있도록 지원하는 것이 연구자들을 실험에 집중할 수 있도록 돕는 길이다. [4]

KISTI에서는 해외에서 서비스되고 있는 결정구조 정보 관련 데이터베이스 현황 조사 및 데이터 분석 과정을 거쳐, 독일의 Fiz-Karlsruhe에서 서비스하고 있는 ICSD를 모델로 무기결정구조 데이터베이스의 설계 및 구축, 검색 시스템을 개발하였다.

ICSD(Inorganic Crystal Structure Database)는 결정구조를 갖는 무기화합물의 서지정보 뿐만 아니라 공간군, 단위격자 파라미터, 원자좌표, 온도

인자를 포함한 포괄적인 구조정보를 제공하는 데이터베이스로서 주로 화학, 물리학, 재료과학, 결정학, 광물학 등의 분야에서 결정구조 해석, 격자 결합, 결정성 등의 결정구조 특성연구에 있어 기초적인 데이터로서 활용된다. ICSD는 1978년 Bonn 대학의 Bergerhoff 교수로부터 시작되어 1990년부터 1998년까지 Gmelin Institute와 Fiz-Karlsruhe가 연합하여 데이터베이스를 구축해왔으며, 1997년부터는 NIST의 Standard Reference Data Project와 연계되어 공동으로 개발되고 있다.[5] 1915년부터 자료가 수집되기 시작하여 2002년 현재 64,000여건의 데이터가 수록되어 있고 매년 2,000건 이상의 데이터가 업데이트되고 있다. 1993년부터 CD-ROM 도스버전이 출시되기 시작하여 올해에 웹 버전이 개발되었고 현재에는 Cosmoplayer software를 이용하여 VRML로 구현된 3차원 결정구조를 볼 수 있으며 PDF 파일로 X-ray Pattern도 볼 수가 있다.

현재 웹사이트에서 공개하고 있는 시스템(ICSD for WWW)을 분석해 보면 아래의 그림 1과 같이 3개의 프로그램으로 나누어져 있다. 먼저 데이터베이스 검색 프로그램인 CRYSTIN과 3차원 결정구조를 보여주는 프로그램인 xtal-3d 그리고 X-ray Pattern을 보여주는 것과 관련된 프로그램인 Lazy P.가 그것이다. 이 중 현재 KISTI에서 중점을 두고 개발한 것은 CRYSTIN 부분이며, 나머지 부분에 대해서는 추후 개발하여 데이터베이스의 기능을 향상시킬 계획을 가지고 있다.

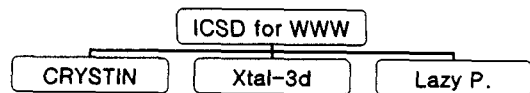


그림 12. 독일 ICSD for WWW의 시스템 구성도

2. 데이터베이스 구성

데이터 수집은 현재 웹에서 공개된 ICSD 일부 데이터 1,000여건을 확보하여 데이터 분석과정을 거쳐 데이터베이스를 설계 및 구축하였다.

아래의 그림 2와 같이 크게 세 부분으로 데이터베이스를 설계하였는데, 첫 번째 부분은 ICSD

부분으로 자료의 collection number와 등록일자, CAS registry number, 화합물 이름, 원소 기호, 격자 상수, 대칭성 정보, residual value, test result, temperature factor unit 등으로 이루어져 있다. 두 번째 부분은 Atomic parameter 부분이다. Atomic parameter는 원자 기호, 원자 수, 산화 상태, Wyckoff number, Wyckoff symbol, X, Y, Z, site occupancy로 이루어져 있다. 마지막 세 번째 부분은 temperature factors 부분이다. temperature factors는 atom symbol, atom number와 각 원소간의 온도 factor로 이루어져 있다. [6]

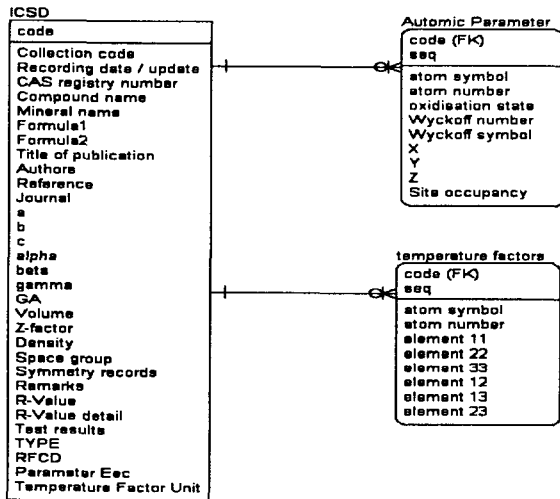


그림 13. E-R Diagram

3. 데이터베이스 검색 시스템 개발

현재 독일의 웹사이트에서 서비스하고 있는 검색화면은 아래의 그림 3과 같다. 검색 결과를 보여주는 창은 그림 4와 같고, 검색화면 아래쪽에 검색 결과 건수 및 결과 목록을 보여주는 방식이다. 그런데 이러한 검색 화면 및 검색 결과 화면은 다양한 검색을 제공하고 있으나 화면구성이 매우 복잡하며 이용자에게 다소 불편함을 주는 형태이다.

따라서 이를 개선하기 위하여 주요한 검색 항목만을 추출하고 사용자들의 편의성을 고려한 항목을 추가하여 검색 시스템을 개발하였다.

Authors	Years	Remarks	S.String	Help Go
Elements	Ele.Count	Mineral N.	Jrnl Coden	ANX Form
Lave class any	System any	Space Grp.	Cell vol.	Pearson S.
Z unit/cell	Min.dist.	Dist.Select	Dist.Range	Co-ordin.

그림 14. ICSD for WWW의 검색화면

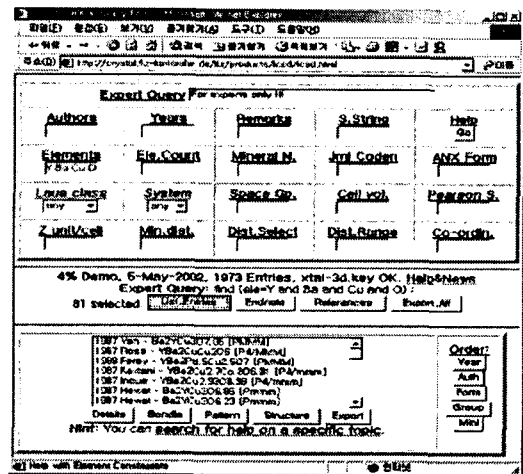


그림 15. ICSD for WWW의 검색결과 화면

The screenshot shows the 'ICSD 검색' (ICSD Search) interface. It includes input fields for 'Compound name', 'Element', 'Space group', 'a', 'b', 'c', 'd', 'e', 'f', 'g', 'h', 'i', 'j', 'k', 'l', 'm', 'n', 'o', 'p', 'q', 'r', 's', 't', 'u', 'v', 'w', 'x', 'y', 'z', 'R-value', 'Title', 'Author', and 'Reference'. There are also buttons for '검색' (Search) and '화기' (Help).

그림 5. 무기결정구조 DB의 검색화면

KISTI의 무기결정구조 데이터베이스 검색 화면은 그림 5와 같다. 먼저 이용자가 검색 조건을 입

력하면 결과를 한 페이지에 15개씩 화합물의 이름과 단위격자 파라미터(a, b, c, α, β, γ)를 그림 8과 같이 보여주었고, 그 중 하나를 선택하면 그 화합물에 대한 상세 정보를 보여주도록 그림 9와 같이 개발하였다.

검색 항목은 무기화합물의 물질 명칭을 그대로 입력하거나 화합물에 포함되는 원소를 선택하여 검색할 수 있도록 개발하였다.

여기에서 이용자가 원소를 선택하여 검색하고자 할 때 “찾기” 버튼을 누르면 그림 6과 같이 주기율표 화면이 나온다. 그러면 이용자는 검색하기 원하는 원소를 선택할 수 있다. 이 때 검색 type을 지정하도록 하였는데, “AND” 또는 “Exclusive AND”중 하나를 선택하면 된다. “AND”를 선택하면 그 지정한 원소가 포함되지만 하고, 다른 선택하지 않은 원소들과 함께 구성된 화합물이 모두 검색되고, “Exclusive AND”를 선택하면 선택한 원소들만으로 구성된 화합물을 검색하게 된다. 검색 type을 지정하도록 한 이유는 보다 세밀한 검색, 효율적인 검색을 지원하기 위함이다. 공간군을 지정하여 검색하는 방식은 먼저 이용자가 “검색” 버튼을 누르면 그림 7과 같이 공간군이 나열되는 새창이 뜨고 그 중 원하는 공간군을 클릭하면 그것이 선택되도록 하였다. 단위격자 파라미터인 a, b, c, α, β, γ는 그 값의 범위를 정하여 검색할 수 있도록 했으며 R-값도 범위를 지정해 입력하여 검색할 수 있도록 하였다. 서지 항목의 검색은 논문 제목과 저자, 그리고 문헌명을 입력하여 검색할 수 있도록 개발하였다.

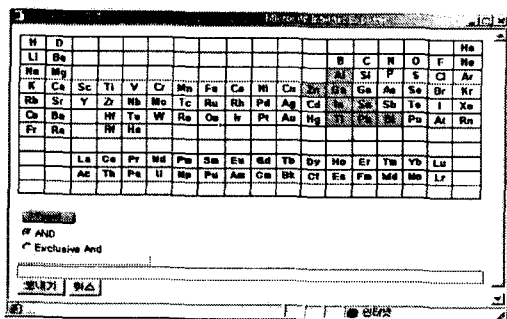


그림 6. Element 선택 화면

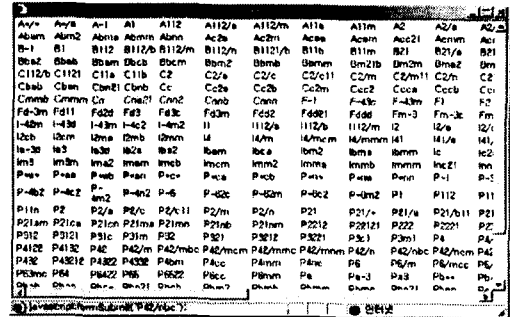


그림 7. Space Group 선택 화면

Inorganic Crystal Structure Database

No.	Formula	Z	SGF	a	b	c	Alpha	Beta	Gamma
1	Cu16O15	1.0	I41/A40Z	5.81X10	5.81X11	3.895X2	90	90	90
2	CuO	4.0	C12/C1	4.807X3	3.422X3	5.129X3	90	90	90
3	Cu2O	2.0	P43/M3	4.261X2	4.261X2	4.261X2	90	90	90
4	CuO	4.0	C12/C1	4.807X3	3.417X3	5.118X3	90	90	90
5	Cu2O	2.0	P43/M3	4.25	4.25	4.25	90	90	90
6	Cu2O	2.0	P43/M3	4.25X4	4.25	4.25	90	90	90
7	CuO	4.0	C12/C1	4.67	3.43	5.12	90	90	90
8	Cu6O	2.0	BM42	3.74	10.58	1.22	90	90	90
9	CuO	2.0	BM42	3.47	8.02	3.34	90	90	90
10	CuO	2.0	P43/M3	4.25X2	4.25X2	4.25X2	90	90	90
11	CuO	4.0	P43/M3	4.261X3	4.261X3	4.261X3	90	90	90
12	CuO	8.0	F222	11.38X3	12.68X3	2.75X3	90	90	90
13	(CuO)2	1.0	AMMA	11.47X3	13.78X3	2.75X3	90	90	90
14	CuO	4.0	C12/C1	4.807X3	3.422X3	5.129X3	90	90	90
15	CuO	4.0	C12/C1	4.687X3	3.423X3	5.137X3	90	90	90

그림 8. 무기결정구조 DB의 검색결과 목록화면

```

CODE 00000
NAME Barite sulfate - S-beta
MNR Barite - from Kuratani mine, Ishikawa, Japan
FORM Ba S O4
- BA1 O4 S1
TITL The crystal structure of barite, beta-BaSO4, at high
temperatures
AUT Sanoeda H, Takouchi Y
REF ZERNB 191 (1998) P. 161-171
JRNL Zeitschrift fuer Kristallographie (199,1979-)
CELL a=0.868(2) b=5.441(1) c=7.182(1) alpha=90 beta=90 gamma=90
SGR P n m 2 (62)

PARAM Atom Nr Ox My X Y Z
Ba 1 +2 Ac 0.1044(4) 0.25 0.1505A(5)
S 1 +6 Ac 0.0627(2) 0.25 0.6966(2)
O 1 -2 Ac 0.0003(6) 0.25 0.6866(8)
O 2 -2 Ac 0.1823(5) 0.25 0.5408(7)
O 3 -2 O4 0.0882(3) 0.0001(6) 0.6116(4)

atom Beta(1,1) Beta(2,2) Beta(3,3) Beta(1,2) Beta(1,3)
Ba 1 0.0010 (5) 0.0006(2) 0.00075 (9) 0.00014 (4)
S 1 0.0018(2) 0.0014(4) 0.003(2) 0.0 0.0001(3)
O 1 0.0027(5) 0.019(2) 0.011(1) 0.0 0.004(6)
O 2 0.0009(5) 0.012(1) 0.004(7) 0.0 0.001(5)
O 3 0.003(3) 0.0067(8) 0.0059(5) 0.0003(5) 0.0007(3)

REM TEN 200
RUAL 0.029
    
```

그림 9. 무기결정구조 DB의 검색결과 상세화면

검색조건을 입력하여 그 조건을 만족하는 화합물들이 검색되면 그 화합물들은 그림 8과 같이 화학식 순으로 정렬되어 목록으로 나타나게 되며 그 목록에서 희망하는 화합물의 화학식을 클릭하게 되면 그 화합물의 서지정보

(제목, 저자, 참고문헌, 잡지명, 권/호/페이지 등)와 물질정보(물질 명칭, 광물 명칭, 화학식 등), 그리고 물성정보(공간군, 셀 부피, R-값 등)의 상세한 물성 값들이 그림 9와 같이 텍스트 및 수치 형태로 나타나게 된다.

III. 향후 발전방향

현재의 데이터베이스에 데이터 추가작업을 계속하여 국내 연구자들에게 최신의 데이터를 신속하고 정확하게 제공할 것이다. 또한 그림 10과 같이 3차원 결정구조를 보여주는 프로그램인 xtal-3d와 그림 11과 같이 X-ray Pattern을 보여주는 프로그램인 Lazy P.와 관련한 개발을 추진할 계획이며, 향후에는 무기화합물의 3차원 결정구조 Visualization과 결정구조 데이터를 응용한 X-ray 패턴 시뮬레이션 그래프 제공이 함께 서비스 되도록 하여 무기결정구조 데이터베이스의 기능을 향상시킬 계획이다.

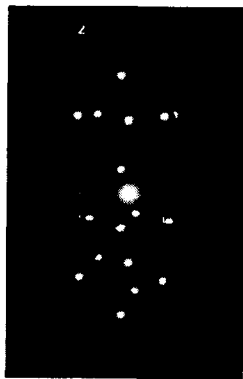


그림 21. 3차원 결정구조

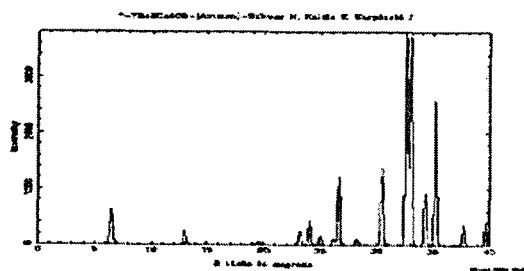


그림 22. XRD Pattern 이미지

IV. 결론

21세기 고부가가치 산업 중 하나인 재료분야 연구를 지원하기 위해 연구자들에게 필요한 데이터베이스를 제공하고자, 산업분야 뿐 아니라 연구분야에서 그 필요성이 증대되고 있는 무기결정구조 데이터베이스를 구축하고 검색 시스템을 개발하였다. 이를 위해 독일 FIZ Karlsruhe의 ICSD 데이터 및 웹사이트를 분석하여 데이터베이스를 설계, 검색 시스템을 개발하였다. 앞으로 지속적인 데이터 추가작업을 진행할 예정이며, 향후에는 이를 응용한 무기화합물의 3차원 결정구조 및 X-ray 패턴을 시뮬레이션 그래프를 함께 제공하여 재료분야 연구자들의 효율적 연구개발을 지원할 계획이다.

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://www.fiz-karlsruhe.de/fiz/products/icsd>