

Presse-Information

Press Release – Communiqué de Presse

Beleg erbeten – A complimentary copy is requested – Veuillez nous envoyer un exemplaire justificatif

Neuer Mehrwert bei ICSD (Inorganic Crystal Structure Database)

FIZ Karlsruhe - Leibniz-Institut für Informationsinfrastruktur hat seine Datenbank ICSD um wichtige Inhalte ergänzt und bietet seinen Kunden aus Wissenschaft und Materialforschung neue Möglichkeiten zur Datennutzung und -analyse.

Karlsruhe, März 2017 – Die weltweit größte Datenbank für vollständig bestimmte anorganische Kristallstrukturen (ICSD) wurde durch zwei wesentliche inhaltliche Ergänzungen verbessert. Zum einen sind die Dokumente durch zahlreiche Autorenabstracts ergänzt worden. Diese Texte gehen über die reinen Strukturinformationen weit hinaus und geben einen Gesamtüberblick zu den entsprechenden wissenschaftlichen Artikeln. Zusätzlich sind die Dokumente mit einem DOI (Digital Object Identifier) versehen, sodass per Klick das Volltextdokument online erreicht werden kann. Zum zweiten hat FIZ Karlsruhe einen eigenen fachlichen Schlagwortschatz entworfen, mit dem die Dokumente indexiert werden. Die Verknüpfung mit diesen Schlagwörtern, die aus einem definierten Thesaurus ausgewählt werden, gewährleistet eine tiefere inhaltliche Erschließung. So können beispielsweise physikalische Eigenschaften der Kristallstrukturen oder ihre Analyse mittels spektroskopischer Verfahren gezielt gesucht werden.

Seit 2017 werden in ICSD auch systematisch erfasste theoretische Strukturen vorgehalten. Dazu wird regelmäßig die entsprechende Fachliteratur durchsucht, die theoretischen Strukturen von dort extrahiert und in ICSD eingebracht. Die Datenbank dient so als Plattform mit standardisierter Ablage zur Nutzung für theoretisch arbeitende Wissenschaftler. Auch wenn diese berechneten Strukturen in vielen Fällen noch nicht experimentell bestätigt wurden, können die Informationen wertvolle Hinweise auf mögliche Polymorphe bieten oder als Startpunkt einer verfeinerten Kristallstrukturanalyse nach der Rietveld-Methode dienen.

„ICSD bietet für die wissenschaftliche Community eine unverzichtbare Grundlage ihrer kristallographischen Forschung. Mit den neuen Inhalten gewinnt diese wertvolle Datenbank insbesondere für die Materialforschung zusätzlich an Bedeutung“, erklärt Sabine Brünger-Weilandt, Direktorin und Geschäftsführerin von FIZ Karlsruhe – Leibniz-Institut für Informationsinfrastruktur.

Weitere Informationen zu ICSD und die neuen, nutzerfreundlichen Angebote finden Sie unter: <https://www.fiz-karlsruhe.de/leistungen/kristallographie/icsd.html>. Heute beginnt die Jahrestagung der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie in Karlsruhe, weitere Informationen unter: <http://www.dgk-conference.de/>. Im Rahmen dieser Tagung findet am 30.3.2017 in der Zeit von 12:00-13:30 Uhr das FIZ Karlsruhe ICSD Lunchtime Symposium statt, bei dem die neuen Inhalte detailliert vorgestellt werden.

ICSD ist die weltweit größte Datenbank für vollständig bestimmte anorganische Kristallstrukturen. Sie enthält die kristallographischen Daten inklusive der Atomkoordinaten publizierter, kristalliner, anorganischer Verbindungen seit 1913. Zurzeit umfasst sie ca. 185.000 Kristallstrukturen. Zweimal im Jahr, im Frühjahr und im Herbst, erscheinen Updates mit aktuellen Daten, die aus einschlägigen Fachzeitschriften und anderen Quellen extrahiert werden.

FIZ Karlsruhe – Leibniz-Institut für Informationsinfrastruktur ist eine gemeinnützige GmbH und hat als eine der größten außeruniversitären Informationsinfrastruktureinrichtungen in Deutschland den öffentlichen Auftrag, Wissenschaft und Forschung mit wissenschaftlicher Information zu versorgen und entsprechende Produkte und Dienstleistungen zu entwickeln. Hierfür erschließt FIZ Karlsruhe sehr große Mengen an Daten aus unterschiedlichsten Quellen, entwickelt und betreibt innovative Informations-Services sowie e-Research-Lösungen und führt eigene Forschungsprojekte durch. FIZ Karlsruhe ist Mitglied der Leibniz-Gemeinschaft, unter deren Dach 91 Einrichtungen vereint sind, die Forschung betreiben und wissenschaftliche Infrastruktur bereitstellen.

Pressekontakt

Ansprechpartner Marketingkommunikation

Rüdiger Mack

Tel.: +49 7247 808 513

[Ruediger.Mack\(at\)fiz-karlsruhe\(dot\)de](mailto:Ruediger.Mack(at)fiz-karlsruhe(dot)de)

Ansprechpartnerin Wissenschaftskommunikation

Dr. Anja Rasche

Tel. +49 7247 808 109

[Anja.Rasche\(at\)fiz-karlsruhe\(dot\)de](mailto:Anja.Rasche(at)fiz-karlsruhe(dot)de)

Weitere Informationen:

FIZ Karlsruhe

Hermann-von-Helmholtz-Platz 1

76344 Eggenstein-Leopoldshafen

Tel.: +49 7247 808 555

Fax: +49 7247 808 259

[helpdesk\(at\)fiz-karlsruhe\(dot\)de](mailto:helpdesk(at)fiz-karlsruhe(dot)de)

Pressemitteilungen abbestellen: Wenn Sie keine Pressemitteilungen von FIZ Karlsruhe mehr erhalten möchten, können Sie uns einfach eine E-Mail mit dem Betreff „Bitte Adresse löschen“ an folgende Adresse schicken: [Ruediger.Mack\(at\)fiz-karlsruhe\(dot\)de](mailto:Ruediger.Mack(at)fiz-karlsruhe(dot)de). Wir werden Ihre Daten umgehend aus unserem Verteiler löschen.