

Nieorganiczna baza danych **(ICSD)**

Podstawowa instrukcja obsługi

Opracowała: mgr Sylwia Radwan
Wydział Chemii Uniwersytetu Wrocławskiego
Zakład Krystalografii




Wrocław 2018

Spis treści

INFORMACJE PODSTAWOWE	2
WYSZUKIWANIE Z WYKORZYSTANIEM SKŁADU CHEMICZNEGO	4
COMBINED QUERIES – ŁĄCZENIE ZAPYTAŃ	6
ANALIZA WYNIKÓW WYSZUKIWANIA I ZAPISYWANIE DANYCH	7
PRZYKŁADY	8

INFORMACJE PODSTAWOWE

Dane krystalograficzne są istotnym elementem wielu rozważań naukowych. Ich niezastąpionym źródłem są krystalograficzne bazy danych, w których deponuje się struktury krystaliczne po ich rozwiązaniu i udokładnieniu. Jedną z najpopularniejszych baz danych jest baza **ICSD** (*Inorganic Crystal Structure Database*), która zawiera obecnie¹ około 193.000 nieorganicznych struktur krystalicznych. Co ciekawe, najstarsze rekordy zdeponowane w ICSD pochodzą z 1913 roku; są to struktury krystaliczne diamentu i chlorku sodu, które rozwiązał W. H. Bragg wraz z synem.

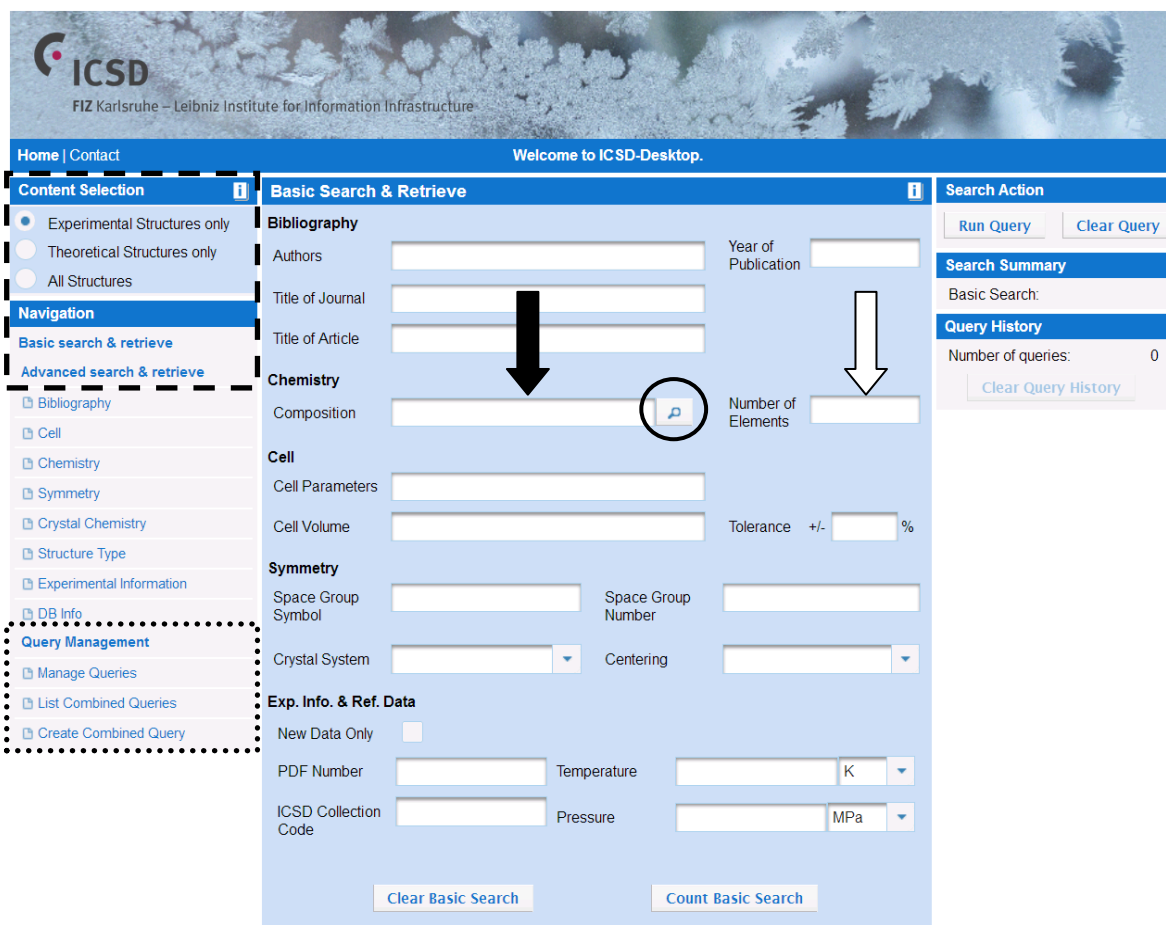
Bazę ICSD uruchamia się poprzez dwukrotne kliknięcie na ikonę . Nowością w obecnej wersji bazy danych jest to, że nowa ICSD **otwiera się w przeglądarce internetowej**.

Po uruchomieniu bazy danych następuje automatyczne przekierowanie do głównego ekranu wyszukiwania (*zdjęcie 1*, zaprezentowany poniżej). Po wskazaniu kursorem dowolnego (białego) wiersza, wyświetlają się szczegółowe informacje dotyczące poszczególnych opcji wyszukiwania. W trakcie pracy na bieżąco zapisuje się historia wyszukiwań (*Query History* po prawej stronie ekranu, *zdjęcie 1*).

Przed rozpoczęciem właściwego wyszukiwania należy wybrać podstawowy (*Basic Search & Retrieve*) lub zaawansowany (*Advanced Search & Retrieve*) tryb pracy, a także zaznaczyć czy przeprowadzane wyszukiwanie dotyczy struktur otrzymanych eksperymentalnie (*Experimental*), teoretycznie (*Theoretical*) czy obu tych grup jednocześnie (*All Structures*). Wersja zaawansowana jest oczywiście rozszerzeniem wersji podstawowej, zawierającym wiele dodatkowych kryteriów wyszukiwania (np. stopnie utlenienia, odległości międzyatomowe i wiele innych). Tryb wyszukiwania można zmienić w każdej chwili, należy jednak pamiętać, że **przejdzie z wersji podstawowej do zaawansowanej zachowuje w pamięci wyszukiwania dane uprzednio wprowadzone w wersji podstawowej**. Przykładowo, jeżeli początkowo wyszukiwano struktury zdeponowane w 2016 roku w wersji *Basic*, a następnie zamieniono wersję wyszukiwania na *Advanced* bez usunięcia poprzednich danych, nowe wyszukiwanie w trybie zaawansowanym uwzględni struktury wyłącznie z 2016 roku, nawet w przypadku wprowadzenia nowych parametrów. **Uwaga! Przy przejściu odwrotnym (z wersji *Advanced* do *Basic*) wprowadzone dane nie zostają zapamiętane** (co jest sygnalizowane odpowiednim komunikatem), a zatem ich usunięcie nie jest wymagane przed zmianą trybu na *Basic*. Możliwe jest również łączenie kilku różnych zapytań, nawet takich, które przeprowadzono w dwóch różnych trybach (część *Combined Queries*, strona 6).

Nieorganiczna baza danych ma pewne ograniczenia. W ICSD **dopuszczalne są tylko takie wyszukiwania, których wynik nie przekracza 10000 pozycji**. W przypadku zbyt szerokiego zakresu wyszukiwań (dla którego wynik zawiera więcej niż 10000 pozycji), baza danych automatycznie zablokuje wyszukiwanie. W takim przypadku konieczne jest zawężenie obszaru poszukiwań. ICSD **nie rozpoznaje znaków diakrytycznych** i nie rozróżnia małych i dużych liter. Zamiast „ą” należy zatem wprowadzić „a”, zamiast „ć” – „c”. Dla pozostałych polskich liter postępuje się analogicznie.

¹ Stan na styczeń 2018 r.



Legal Notices | Copyright © FIZ Karlsruhe 2018

Zdjęcie 1. Startowy ekran wyszukiwania w bazie danych ICSD. Kreskowaną ramką zaznaczono opcje umożliwiające wybór wyszukiwanych struktur (eksperymentalne/teoretyczne), jak również dwa tryby wyszukiwania: podstawowy oraz zaawansowany. Kropkowaną ramką zakreśla opcje umożliwiające zarządzanie zapytaniami łączonymi. Czarna strzałka wskazuje na wiersz umożliwiający wyszukiwanie struktur z wykorzystaniem ich składu chemicznego, a strzałka biała – obszar, w którym deklaruje się ilość pierwiastków w składzie chemicznym związku. Narzędzie lupy, oznaczone czarnym okręgiem, pozwala na otwarcie okna z układem okresowym (opis w tekście poniżej).

WYSZUKIWANIE Z WYKORZYSTANIEM SKŁADU CHEMICZNEGO

Uwaga! Poniższy opis dotyczy struktur eksperymentalnych wyszukiwanych w trybie podstawowym (Basic). Wyszukiwanie struktur teoretycznych/w trybie zaawansowanym przeprowadza się analogicznie.

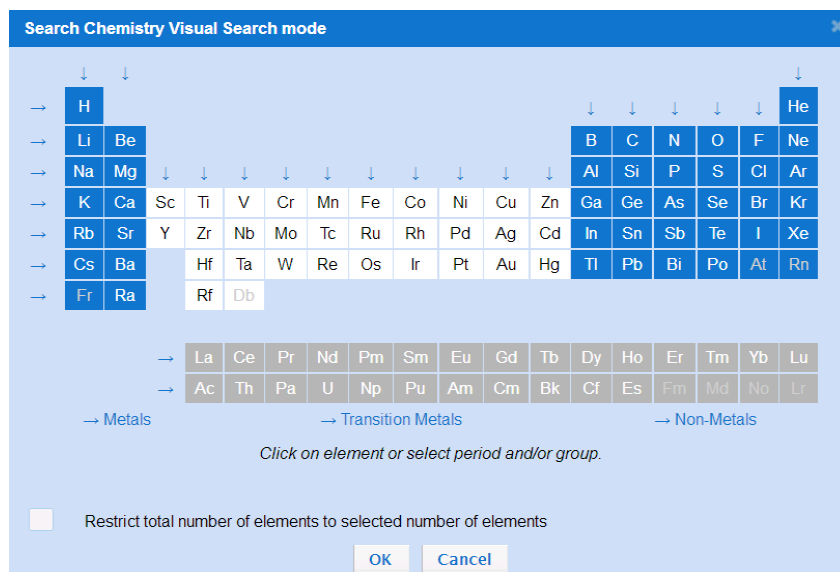
Podstawowym sposobem pracy z ICSD jest wyszukiwanie struktur krystalicznych z wykorzystaniem składu chemicznego badanego związku. Na *zdjęciu 1* czarną strzałką oznaczono wiersz, w którym należy wpisać (rozdzielając spacją) symbole chemiczne pierwiastków obecnych w wyszukiwanym związku (wiersz *Composition*). Jak wspomniano wcześniej w części **INFORMACJE PODSTAWOWE**, baza danych nie rozróżnia małych i dużych liter; symbol pierwiastka można wpisać małymi lub dużymi literami. Wyszukiwanie rozpoczyna się kliknięciem w pole *Run Query* (umieszczone po prawej stronie ekranu) lub wciśnięciem przycisku enter na klawiaturze.

Obok pola *Composition* umieszczono funkcję *Number of Elements* (biała strzałka na *zdjęciu 1*), która umożliwia sprecyzowanie ile różnych pierwiastków dopuszcza się w poszukiwanym związku podczas wyszukiwania. Funkcja *Number of Elements* pozwala zatem na zawężenie obszaru poszukiwań do związków dwu-, trójpierwiastkowych itd., a także proste zablokowanie wyszukiwania niepożądanych pierwiastków (**PRZYKŁAD 1**). W polu *Number of Elements* można wprowadzić również zakresy wyszukiwania (np. <2 – poniżej dwóch pierwiastków, <=2 – mniej lub równo dwa pierwiastki, >2 więcej niż dwa pierwiastki i tak dalej; **PRZYKŁAD 2**).

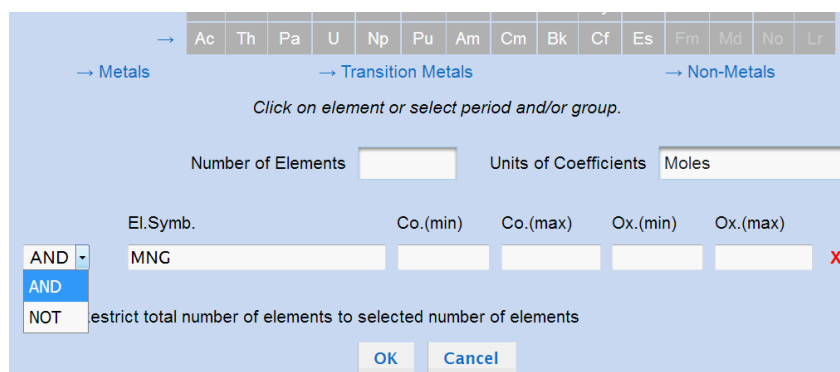
Baza danych umożliwia odrzucenie pojedynczych lub całych grup pierwiastków z obszaru wyszukiwania (symbol „-” przed nazwą pierwiastka lub grupy bez spacji pomiędzy minusem, a symbolem pierwiastka; **PRZYKŁAD 3**). Uwaga! Wskazanie więcej niż jednego niepożądanego pierwiastka (lub grupy) wymaga użycia kolejnych „-” (np. La Co -BEG² -O, zamiast La Co -BEG O). W trakcie wyszukiwania możliwe jest również użycie funkcji OR [symbol „()”], która umożliwia wyszukanie związków zawierających jednocześnie oba wskazane związki, ale również związki tych pierwiastków oddzielnie (**PRZYKŁAD 4**).

Istnieje również możliwość wprowadzenia symboli pierwiastków bezpośrednio z układu okresowego; kliknięcie na „lupę” umieszczoną obok wiersza *Composition* (oznaczoną okręgiem na *zdjęciu 1*) otwiera okno z układem okresowym (*zdjęcie 2a*). Strzałki widoczne na *zdjęciu 2a* umożliwiają zaznaczenie całych grup lub okresów obecnych w układzie okresowym, a także grupy: metali, niemetalów oraz metali przejściowych. We wspomnianym oknie można również dodać/wykluczyć pewne grupy pierwiastków (lub pojedyncze pierwiastki), bez konieczności ręcznego wpisywania komend w polu *Composition* (funkcje AND oraz NOT pojawiające się pod układem okresowym dopiero po kliknięciu w dowolną strzałkę/pierwiastek lub wpisaniu symbolu pierwiastka w polu *Composition*, *zdjęcie 2b*), a także zdefiniować stopień utlenienia wyszukiwanych pierwiastków (pole *Ox*).

²Symbol BEG oznacza grupę berylowców. Symbole poszczególnych grup (lub okresów) można poznać zaznaczając je w układzie okresowym.



Zdjęcie 2a. Układ okresowy zamieszczony w ICSD.

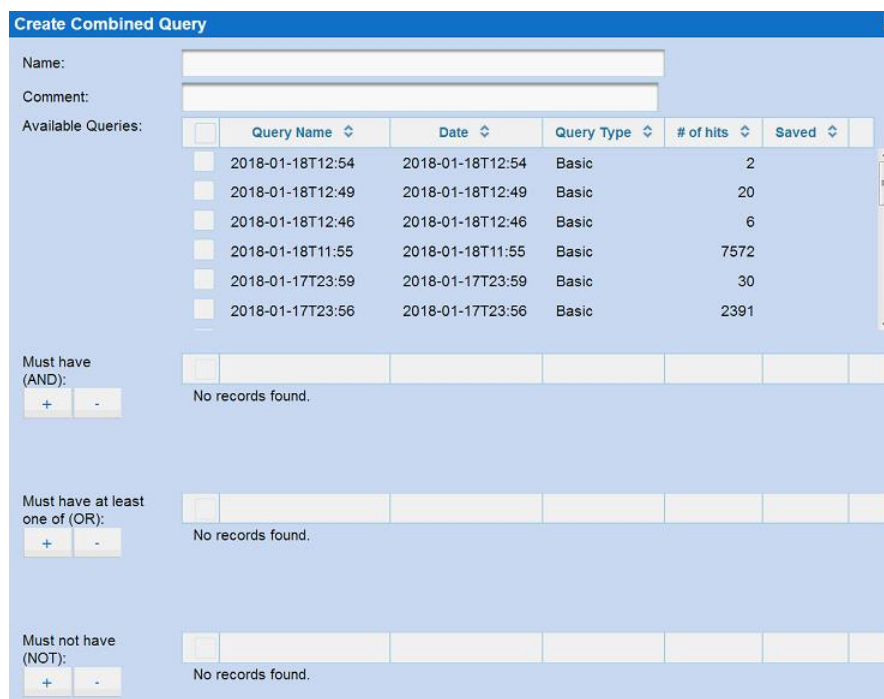


Zdjęcie 2b. Funkcje AND oraz NOT, umożliwiające wykluczenie bądź dodanie wybranych pierwiastków (lub całych grup/okresów) do składu chemicznego wyszukiwanego związku, bez konieczności wpisywania ręcznego w polu *Composition*.

W ICSD możliwe są również wyszukiwania pomijające skład pierwiastkowy związku. Wybraną strukturę krystaliczną można znaleźć w bazie danych wpisując np.: nazwiska autorów, rok publikacji, parametry komórki sieciowej lub numer identyfikacyjny danej struktury. Oczywiście, można łączyć ze sobą różne parametry wyszukiwania (np. struktury krystaliczne związków lantanu, ale zdeponowane wyłącznie w 2013 roku lub struktury tlenków azotu opublikowane jedynie przez wybranego autora itd.). Jak wspomniano wcześniej, szczegóły dotyczące każdej funkcji można uzyskać poprzez wskazanie kursorem interesującego nas pola.

COMBINED QUERIES – ŁĄCZENIE ZAPYTAŃ

Neorganiczna baza danych umożliwia łączenie kilku różnych zapytań/wyników wyszukiwań o odmiennych parametrach w jedno (funkcja *Combined Queries*, zaznaczona na zdjęciu 1 kropkowaną ramką), dając dodatkową możliwość odrzucenia pewnych wyników, których nie można zablokować na poziomie prostego wyszukiwania. Warto zaznaczyć, iż funkcja *Combined Queries* pozwala na łączenie wyników wyszukiwań wykonanych w trybach *Basic* i *Advanced*. Łączone zapytania można utworzyć w oknie *Create Combined Query* (zdjęcie 3), dodając jednocześnie nazwę i komentarz (pola *Name* oraz *Comment*).



<input type="checkbox"/>	Query Name	Date	Query Type	# of hits	Saved
<input type="checkbox"/>	2018-01-18T12:54	2018-01-18T12:54	Basic	2	
<input type="checkbox"/>	2018-01-18T12:49	2018-01-18T12:49	Basic	20	
<input type="checkbox"/>	2018-01-18T12:46	2018-01-18T12:46	Basic	6	
<input type="checkbox"/>	2018-01-18T11:55	2018-01-18T11:55	Basic	7572	
<input type="checkbox"/>	2018-01-17T23:59	2018-01-17T23:59	Basic	30	
<input type="checkbox"/>	2018-01-17T23:56	2018-01-17T23:56	Basic	2391	

Zdjęcie 3. Okno umożliwiające tworzenie zapytań łączonych.

Przygotowanie wyszukiwania łączonego jest proste; wystarczy wybrać z listy (widocznej na zdjęciu 3 u góry ekranu) interesujące nas wyniki wyszukiwań i połączyć je klikając na symbol „+”. Zaznaczenie można cofnąć, klikając „-”. Istnieją trzy funkcje dla wyszukiwań łączonych: *must have*, *must have at least one of* i *must not have*. Umieszczenie wybranych wyników wyszukiwań (przykładowo oznaczonych jako A oraz B) w polu *must have* spowoduje, że wśród wyników ich wyszukiwania łączonego muszą znaleźć się elementy wspólne dla A i B.

Pole *must not have* pozwala na odrzucenie wszystkich elementów pochodzących z wyszukiwania umieszczonego w tym polu. Przykładowo, jeżeli umieścimy wyszukiwania C i D w polu *must have*, a wyszukiwanie E w kategorii *must not have*, to otrzymane wyniki będą zawierać w sobie wyłącznie elementy pochodzące z sumy C i D. Elementy wspólne dla C i E oraz D i E zostaną całkowicie wykluczone z przeprowadzonego wyszukiwania.

Pole *must have at least one of* umożliwia utworzenie takiego wyszukiwania łączonego, którego wynik musi zawierać elementy pochodzące przynajmniej z jednego elementu wyszukiwania. Przykładowo, *Combined Query* stworzone z wyszukiwań F i G umieszczonych w polu *must have at least one of* da wynik składający się z elementów pochodzących wyłącznie z F i wyłącznie z G (oddzielnie), a także ich elementów wspólnych.

ANALIZA WYNIKÓW WYSZUKIWANIA I ZAPISYWANIE DANYCH

Po zakończeniu wyszukiwania jego wynik wyświetla się w formie przejrzystej listy, zawierającej najważniejsze informacje dotyczące znalezionych struktur krystalicznych: numer identyfikacyjny, nazwiska autorów, odniesienie do publikacji, wzór sumaryczny, grupę przestrzenną, w której krystalizuje dany związek, a także typ struktury krystalicznej (zdjęcie 4).

Results: List View # of Hits: 2

Select All Delect All Show Detailed View Show Synoptic View Export Selected Data Back to Query

Coll. Code	HMS	Struct. Form.	Struct. Type	Title	Authors	Reference	
<input checked="" type="checkbox"/> 53779	F d -3 m S C		Diamond-C(cF8)	Structure of some crystals	Hull, W.H.; Bragg, W.L.	Proceedings of the Royal Society of London, Series A: Mathematical and Physical Sciences (76,1906-) (1913) 33, (*) p277-p277	
<input checked="" type="checkbox"/> 53815	F m -3 m	Na Cl	NaCl	Structure of some crystals	Bragg, W.H.; Bragg, W.L.	Proceedings of the Royal Society of London, Series A: Mathematical and Physical Sciences (76,1906-) (1913) 88, (*) p428-p428	

Zdjęcie 4. Przykładowy wynik wyszukiwania. Biała strzałka wskazuje na narzędzie umożliwiające sortowanie wyników.

Otrzymane wyniki można posegregować rosnąco lub malejąco; wystarczy kliknąć na nazwę parametru, według którego musi odbyć się segregacja, a następnie na mały trójkąt, który pojawi się przy nazwie parametru bezpośrednio po kliknięciu (zaznaczony na zdjęciu 4 strzałką). Gwiazdki umieszczone przy danej pozycji wyróżniają dane krystalograficzne wysokiej jakości. Szczegóły danej struktury krystalicznej można rozwinąć klikając w pole *Show Detailed View* po jej zaznaczeniu z lewej strony ekranu (czarny okrąg na zdjęciu 4). W ICSD dopuszcza się również wyodrębnienie poszczególnych wyników spośród innych, poprzez ich zaznaczenie i użycie funkcji *Show Synoptic View*. Po użyciu funkcji *Show Synoptic View* możliwe jest również zapoznanie się z symulowanymi dyfraktogramami proszkowymi wyszczególnionych struktur (*Display Powder Patterns*) i przestrzenna wizualizacja tych struktur (*Display Crystal Structures*). Pobranie pliku w formacie .cif jest możliwe poprzez kliknięcie w ikonę dyskiety znajdującej się po prawej stronie tabeli. Zapisanie plików w innych formatach (.txt, .csv, .xls) zarówno dla jednej, jak i wielu pozycji jest możliwe po zaznaczeniu wybranych struktur krystalicznych, a następnie użycie funkcji *Export Selected Data*, umieszczonej bezpośrednio nad tabelą z wynikami wyszukiwania. Istnieje również możliwość zapisania dyfraktogramów proszkowych wyszukanych struktur – kliknięcie na pole *Export as x-y data* albo *Export as table* (znajdujące się bezpośrednio pod dyfraktogramami proszkowymi) umożliwia ich zapisanie w wybranym przez nas formacie.

PRZYKŁADY

Uwaga! Opisywane poniżej przykłady dotyczą struktur wyłącznie eksperymentalnych, wyszukiwanych w trybie podstawowym (Basic).

PRZYKŁAD 1

Obszar zainteresowania: struktury krystaliczne lantanu.

Po wpisaniu komendy **La** (lantan) w pole *Composition* pojawia się komunikat o przekroczeniu dopuszczalnej ilości wyszukanych struktur krystalicznych (wśród otrzymanych wyników znalazły się struktury krystaliczne samego lantanu, ale również jego licznych związków). Dopiero zawężenie obszaru wyszukiwania do struktur jednopierwiastkowych (poprzez wpisanie **1** w polu *Number of Elements*) umożliwia wyszukanie struktur krystalicznych samego lantanu, bez jego związków.

PRZYKŁAD 2

Obszar zainteresowania: struktury krystaliczne związków lantanu zawierających co najmniej cztery różne pierwiastki chemiczne w swoim składzie.

Po wpisaniu komendy **La** w pole *Composition* oraz **4** w pole *Number of Elements*, wyszukane zostają wyłącznie czteropierwiastkowe związki lantanu. Dopiero po zmianie komendy **4** na **>=4** w polu *Number of Elements*, wśród znalezionych rekordów znajdują się struktury krystaliczne związków lantanu zawierających cztery i więcej różnych pierwiastków w swojej strukturze.

PRZYKŁAD 3

Obszar zainteresowania: trójpierwiastkowe struktury krystaliczne związków zawierających lantan i kobalt (jednocześnie) z wyłączeniem grupy berylowców.

Po wpisaniu komendy **La Co** (lantan i kobalt) w pole *Composition* oraz **3** w pole *Number of Elements* wyszukane zostają wszystkie trójpierwiastkowe związki zawierające jednocześnie lantan i kobalt, a także inne pierwiastki (w tym berylowce). Dopiero po użyciu komendy **La Co -BEG** (koniecznie bez spacji po minusie) wśród wyszukanych struktur nie ma związków zawierających berylowce.

PRZYKŁAD 4

Obszar zainteresowania: struktury krystaliczne trójpierwiastkowych związków lantanu lub kobaltu oraz lantanu i kobaltu (w jednym związku).

Po wpisaniu komendy **(La Co)** w pole *Composition* oraz **3** w pole *Number of Elements* otrzymano wszystkie struktury krystaliczne trójpierwiastkowych związków lantanu lub kobaltu z innymi pierwiastkami, a także związki zawierające jednocześnie zarówno lantan, jak i kobalt w swoim składzie.