

Presse-Information

Press Release – Communiqué de Presse

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

Alle Kristallstrukturen kleiner Moleküle auf einen Blick

FIZ Karlsruhe und CCDC vereinbaren Kooperation für ein gemeinsames Projekt, das den gleichzeitigen Zugriff auf zwei voneinander unabhängige Datenbanken ermöglicht.

Karlsruhe, April 2017 — FIZ Karlsruhe – Leibniz-Institut für Informationsinfrastruktur (FIZ Karlsruhe) und das Cambridge Crystallographic Data Centre (The CCDC) geben den Beginn eines gemeinsamen Entwicklungsprojekts bekannt. Damit wird es erstmals möglich, Daten zu Kristallstrukturen über alle Chemie-Disziplinen – Organik, Anorganik, Metallorganik – hinweg gemeinsam zu deponieren und zugänglich zu machen. Die daraus resultierenden Funktionalitäten – die Suche in über einer Million kristallographischer Strukturen und die zentrale Deponierung von Daten für die Cambridge Structural Database (CSD) des CCDC und FIZ Karlsruhes Inorganic Crystal Structure Database (ICSD) sowie die ihnen zugrundeliegenden CIF-Depots – bieten große Vorteile für Forscher und Lehrende in allen Chemie-Disziplinen. Zwei zuverlässige Datenbankbetreiber im Bereich Chemie schließen sich zusammen, um den umfassenden Zugriff auf sämtliche jemals veröffentlichten Strukturen zu ermöglichen. Darüber hinaus sind alle Einträge durch Links mit Veröffentlichungen und Informationsquellen von Drittanbietern verknüpft. Besonders interessant ist diese Entwicklung für Wissenschaftler, deren Forschung die Grenzen zwischen organischer, anorganischer und metallorganischer Chemie überschreitet.

CCDC und FIZ Karlsruhe arbeiten bereits seit langem eng zusammen. CSD ist das weltweit führende Repositorium für organische und metallorganische Kristallographiedaten und enthält über 875.000 Einträge zu sämtlichen veröffentlichten Strukturen. ICSD erfüllt denselben Zweck für die anorganische Chemie und umfasst mehr als 185.000 Strukturen, die Datenbankinhalte überschneiden sich jedoch kaum. Die jüngsten Fortschritte in verschiedenen Bereichen der Materialforschung, z. B. Forschungen zur Entwicklung neuer Batterien, Gasspeichersysteme, Zeolithe, Katalysatoren, Magnete und Treibstoffzusätze, haben die Schwierigkeiten verdeutlicht, denen sich Forscher auf diesen Gebieten ausgesetzt sehen, weil sie mit zwei voneinander unabhängigen

Datenquellen arbeiten müssen. CCDC und FIZ Karlsruhe arbeiten ab sofort an einem gemeinsamen Kristallstrukturdepot und damit an einer Lösung, die es Chemikern ermöglicht, auf die für sie interessanten Strukturen aus beiden Repositorien in einem Schritt zuzugreifen. Entsprechend können Kristallographen ihre Daten dann auch in einem gemeinsamen Portal zentral deponieren. Die vorhandenen Arbeitsabläufe zur professionellen Datenpflege und -veröffentlichung sowohl bei FIZ Karlsruhe als auch bei CCDC werden beibehalten, sodass die Nutzer nach wie vor über die Datenbanken CSD und ICSD Zugang zu hochwertigen Daten und fortschrittlichen Analysefunktionalitäten haben, auf die sie sich verlassen können.

„Die vereinbarte Zusammenarbeit von FIZ Karlsruhe und CCDC bringt große Vorteile für die Community. Sie profitiert davon, dass Forschungsdaten besser zugänglich gemacht werden, weil in dem gemeinsamen Portal alle anorganischen und organischen Kristallstrukturen zentral an einer Stelle deponiert und abgerufen werden können“, betont Sabine Brünger-Weilandt, Direktorin und Geschäftsführerin von FIZ Karlsruhe – Leibniz-Institut für Informationsinfrastruktur.

„Die International Union of Crystallography begrüßt dieses neue Entwicklungsprojekt und die vereinfachte Deponierung von Kristallstrukturen, die dadurch möglich wird. Wir fördern Synergien zwischen Kristallographie-Datenbanken und erwarten, dass die Zusammenarbeit von CSD und ICSD zu einer Zunahme bei der Datendeponierung führen wird und die Daten leichter zugänglich werden“, kommentiert Peter Strickland, Executive Managing Editor, IUCr Journals.

Planungen und Entwicklungsarbeit für die Zusammenarbeit haben bereits begonnen. Die ersten Ergebnisse werden im Laufe des Jahres 2017 veröffentlicht und über www.ccdc.cam.ac.uk und www.fiz-karlsruhe.de abrufbar sein. Die beiden Datenbanken ICSD und CSD werden wie bisher auch unabhängig voneinander über CCDC bzw. FIZ Karlsruhe angeboten und weiterentwickelt.

CSD ist die weltweit einzige umfassende, aktuelle Kristallstruktur-Datenbank für kleine organische und metallorganische Moleküle. Sie entstand vor mehr als 50 Jahren und umfasst heute mehr als 875.000 Einträge.

CCDC unterstützt die Strukturchemie, indem es Forschungsstudien durchführt und die Datenbank CSD erstellt. Darüber hinaus unterstützt CCDC die Forschung durch Strukturanalyse-Software und professionelle Forschungsdienstleistungen. CCDC ist aus dem Department of Chemistry der Universität Cambridge hervorgegangen und eine unabhängige Forschungsorganisation des UK Research Council und ein Partnerinstitut der Universität Cambridge.

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.