



Eine kristallographische Datenbank für Minerale

Die „American Mineralogist Crystal Structure Database“ wurde am Department of Mineralogy der University of Arizona entwickelt und enthält bibliographische und kristallographische Informationen zu mehr als tausend Mineralen.^[1] Sie basiert auf Strukturdaten, welche in den Fachzeitschriften *American Mineralogist*, *The Canadian Mineralogist*, *The European Journal of Mineralogy* sowie *Physics and Chemistry of Minerals* publiziert wurden; die letztgenannte Zeitschrift ist allerdings noch nicht vollständig erfasst.

Die Suchmaske befindet sich direkt auf der insgesamt sehr schlicht gehaltenen AMCSD-Hauptseite (Abbildung 1): Die Suchbegriffe können mit AND oder OR verknüpft werden, der

Nutzer kann zwischen dem AMC- und dem CIF-Format für Ausgabedateien wählen. Im unteren Bereich der Seite sind die Verfasser und die Einrichtungen aufgeführt und verlinkt, von denen die Datenbank unterstützt und finanziert wird. Diese Übersichtlichkeit ermöglicht eine schnelle Suche. Wünschenswert ist allerdings eine optisch etwas ansprechendere Gestaltung der doch recht kargen Seite.

Die Datenbank kann nach den Feldern „Mineral“, „Autor“, „chemische Suche“ und „Zellparameter und Symmetrie“ durchsucht werden; aber auch eine freie Stichwortsuche ist möglich. Zusätzlich können Hinweise zur Eingabe von Suchbegriffen aufgerufen werden. Als sinnvoll erweist sich eine Suche unter Verwendung der für die ersten beiden Punkte vorgeschlagenen alphabetischen Namenslisten, da beispielsweise die Suche nach Kryolith ausschließlich bei der korrekten englischen Schreibweise „Cryolite“ erfolgreich ist – z. B. führt die Eingabe von „Cryolit“ nicht zum gewünschten Ergebnis. Leider wurde keine zusätzliche systematische Einteilung nach Mineralklassen vorgenommen. Unter „chemische Suche“ können Elementkombinationen aus dem Periodensystem direkt ausgewählt werden; unter „Zellparameter und Symmetrie“ können Grenzen für die Zellmetrik, das gewünschte Kristallsystem oder die Raumgruppe als Suchkriterien angegeben werden. Dies stellt einen wesentlichen Vorteil der AMCSD-Datenbank gegenüber anderen frei zugänglichen Mineraldatenbanken dar, deren spärliche kristallographische Angaben zu Mineralen sich meist auf das Kristallsystem beschränken. Dagegen enthält die Ausgabedatei der AMCSD neben dem Literaturzitat sowohl Angaben zur Raumgruppe als auch Atompositionen und – sofern in der Literatur aufgeführt – die Besetzungs- und Auslenkungsparameter. Alle Strukturdaten wurden eingehend auf Konsistenz geprüft; falls

notwendig wurden Korrekturen vorgenommen sowie Kommentare eingefügt. Aus diesem Grund ist die abrufbare Datenmenge bisher noch relativ gering, sodass die AMCSD im Vergleich zu kommerziellen kristallographischen Datenbanken wie zum Beispiel der Inorganic Crystal Structure Database des FIZ Karlsruhe bei umfassenden Recherchen schlechter abschneidet. Dagegen wird die AMCSD in relativ kurzen Abständen aktualisiert und ist nicht kostenpflichtig, sogar eine Registrierung entfällt für den Nutzer, was die Suchdauer verkürzt.

Die Strukturdaten und theoretischen Röntgenpulverdiffraktogramme können z. B. mit Hilfe der frei im Netz verfügbaren Programme XTalDraw und XPow visualisiert werden. Über den Link „Extra“ auf der Startseite können diese heruntergeladen werden. Die AMC-Ausgabedateien lassen sich dort direkt einlesen, sodass eine routinemäßige Überprüfung oder ein Vergleich z. B. eigener Ergebnisse mit publiziertem Material durch diese Datenbank erleichtert wird.

Die Erweiterung des Strukturdatenmaterials und eventuell auch der Ausbau der Suchoptionen können diese Datenbank zu einer Alternative zu kristallographischen Datenbanken machen. Damit stellt die American Mineralogist Crystal Structure Database ein unkompliziertes Suchinstrument für alle dar, die sich mit kristallographischen und mineralogischen Fragestellungen beschäftigen.

Diana Hoppe, Michael Ruck
Technische Universität Dresden
(Deutschland)

[1] R. T. Downs, M. Hall-Wallace, *Am. Mineral.* **2003**, 88, 247.

Abbildung 1. Tausende von Mineralen sind über die karge Einstiegsseite zugänglich, deren Strukturen z. B. mit XtalDraw visualisiert werden können (Inset).

Für mehr Informationen besuchen Sie
<http://www.geo.arizona.edu/AMS/>
oder nehmen Sie Kontakt auf mit
downs@geo.arizona.edu