



FIZnews

KONTAKT

Dr. Babett Bolle
Kommunikation
Tel. +49 7247 808 513
babett.bolle@fiz-karlsruhe.de

Dr. Franziska Schneider-Willenbacher
Referentin für Wissenschaftskommunikation
Tel. +49 7247 808-525
franziska.schneider-willenbacher@fiz-karlsruhe.de

Seite 1 von 2

40 Jahre ICSD – vom Papierarchiv zum digitalen Goldschatz

Als in den späten 70er Jahren die ersten Kristallstrukturen gesammelt wurden, war die Vision klar: eine verlässliche Sammlung anorganischer Strukturen schaffen, die Forschende weltweit unterstützt. Was damals noch mit Papierstapeln begann, ist heute eine der wichtigsten Datenbanken der Materialforschung – die *Inorganic Crystal Structure Database* (ICSD).

1980 kam FIZ Karlsruhe als technischer Host hinzu, fünf Jahre später auch als inhaltlicher Partner. Von Anfang an galt: höchste Standards, maximale Verlässlichkeit. Der Weg führte vom Papierarchiv zur vollständigen Digitalisierung, später zum großen Sprung ins Netz – plötzlich war ICSD weltweit und jederzeit verfügbar.

Seither hat sich die Datenbank kontinuierlich weiterentwickelt. Neue Datentypen wie metallorganische oder theoretisch berechnete Strukturen kamen hinzu. Kooperationen mit internationalen Partnern – etwa dem National Institute of Standards and Technology oder dem Cambridge Crystallographic Data Centre – machten ICSD noch vielseitiger. Mit der Einführung einer API im Jahr 2020 ist die Datenbank heute direkt in Forschungs-Workflows eingebunden und ein Treiber für automatisierte Materialforschung.

Trotz dieser Dynamik bleibt ein Punkt unverändert wichtig: Qualität. Rund 16.000 neue Strukturen kommen jährlich hinzu, jede wird geprüft – automatisch und von Hand. Künstliche Intelligenz unterstützt dabei, etwa bei der Zuordnung von Strukturtypen, während ältere Daten laufend überarbeitet werden. ICSD wächst also nicht nur, sondern wird ständig verbessert.

Heute ist die Datenbank für viele Forschungsfelder unverzichtbar. Ob Halbleiter, Energiespeicher oder andere Hightech-Anwendungen – wer neue Materialien entwickeln will, braucht hochwertige, konsistente Daten. ICSD ist dabei eng vernetzt, zum Beispiel mit dem Materials Project oder OQMD. Daten fließen in beide Richtungen: Strukturen aus ICSD bilden die Basis für neue Berechnungen, deren Ergebnisse wiederum in die Datenbank zurückkehren.

Zum 40. Jubiläum geht der Blick nicht nur zurück, sondern auch nach vorn. Die Suchoberfläche wird modernisiert, neue Tools für die direkte Datenverarbeitung sind in Arbeit, und Fragen rund um den verantwortungsvollen Einsatz von KI werden aktiv bearbeitet. Ziel ist es, ICSD noch stärker zu vernetzen, noch nutzerfreundlicher zu machen – und vielleicht eines Tages vollständig Open Access anzubieten zu können.

Aus einem Stapel Papierausdrucke ist in vier Jahrzehnten ein digitaler Goldschatz geworden, der die Materialforschung weltweit prägt. Und die Geschichte ist noch lange nicht zu Ende.

Pressekontakt

Kommunikation

Dr. Babett Bolle

Tel. +49 7247 808 513

babett.bolle@fiz-karlsruhe.de

Referentin für

Wissenschaftskommunikation

Dr. Franziska Schneider-Willenbacher

Tel. +49 7247 808-525

[franziska.schneider-willenbacher@](mailto:franziska.schneider-willenbacher@fiz-karlsruhe.de)

[fiz-karlsruhe.de](mailto:franziska.schneider-willenbacher@fiz-karlsruhe.de)

Weitere Informationen

FIZ Karlsruhe – Leibniz-Institut für
Informationsinfrastruktur

Hermann-von-Helmholtz-Platz 1
76344 Eggenstein-Leopoldshafen

Tel. +49 7247 808 0

E-Mail

contact@fiz-karlsruhe.de