

어휘 사전의 작성 규칙 (2021.10.19.)

1. 본 소재 데이터 표준어휘 사전은 json 포맷을 사용하여 소재 데이터의 구조와 소재 데이터에서 사용되는 keyword 들을 정의한다.
2. 각 데이터 keyword 들은 아래의 정보를 담고 있다.
 - eng_definition : keyword의 영문 설명
 - var_name : keyword의 DB 시스템 변수명
 - alias : keyword와 동일한 의미로 사용되는 용어
 - data_type : keyword에 해당하는 데이터의 형태
 - data_unit : keyword에 해당하는 데이터의 단위
 - data_example : keyword에 해당하는 데이터의 예시

(중요) 이들 명칭을 이용하여 parsing한 어휘 사전의 정보를 바탕으로 플랫폼이 구축된다. 따라서, 위 명칭들은 어휘 사전에서 오류없이 사용되어야 한다.
3. 국제표준어휘와의 연동을 위해 keyword는 모두 영문어휘를 사용한다.
4. 본 사전에 사용되는 모든 keyword는 고유명사를 제외하고 소문자로 작성한다.
예) chemical information; Czochralski growth method
5. keyword의 괄호로 표시된 영역은 실제 data로 대체된다. 같은 성격의 반복되는 키워드는 뒤에 _(n)을 붙인다.
예)

본 사전 내의 keyword	실제 데이터 예
materials_(n)	"materials_1"
precursor_(n)	"precursor_3"
(process)	"chemical synthesis"
(analysis)	"optical microscopy"
(unit)	"g/mole"

6. DB 시스템 변수명은 keyword의 단어를 대문자로 시작하는 단어로 변환하여 붙여서 구성한다. 다만 필요할 때는 단축어를 사용할 수 있다.
예) "structural property" → StructuralProperty
"optical performance" → OptPerf
7. data_type으로는 아래의 것들이 있다.
 - * string : 문자열 데이터
 - * numeric : 수치 데이터

- * numeric array : 테이블형 수치 데이터
- * dictionary : {key_1:data_1, key_2:data_2, , key_n:data_n}

- 모든 numeric 데이터의 data_unit은 SI 단위계를 사용한다.
- 모든 numeric 데이터는 value와 불확도 uncertainty를 가진다. uncertainty는 절대불확도를 value와 같은 unit의 값으로 제공한다.

예)

```

▼ melting temperature {6}
  eng_definition : temperature at the materials melt
  var_name : MeltingTemperature
  alias : value
  ▼ value {5}
    eng_definition : data value
    var_name : DataValue
    data_type : numeric
    data_unit : K
    data_example : 2500
  ▼ uncertainty {4}
    eng_definition : uncertainty of the value
    var_name : Uncertainty
    data_type : numeric
    data_unit : same as value

```

- numeric array 데이터는 어휘사전의 numeric data expression의 array numeric data의 형태를 갖는다. numeric array 데이터의 "data_unit"은 "value_unit"에 반영된다.
- dictionary data_type인 경우에는 각 key와 해당 데이터 형태를 정의하여야 한다.

예)

```

▼ composition {5}
  eng_definition : constituent of materials
  var_name : Composition
  alias : value
  data_type : dictionary {element_symbol:constituent
    value,...,unit:string,uncertainty:uncertainty value}
  data_example : {Pt:56.0, Ni:34.7, unit:at.%, uncertainty:0.1}; {Fe:97.8,
    C:2.2, unit:wt.%, uncertainty:0.2}

```

- data_example의 예시들은 세미콜론 (;) 으로 구분한다. 복수 개의 alias 역시 세미콜론 (;)으로 구분한다.

예) annealed INCONEL625 plate; Al7075-T6; Al10Si5Mg; Fe; TiO2 on CNT

13. array로 제시되는 data_example은 제시된 list 중 하나를 데이터로 갖는다.

예)

```
▼ data example [4]
  0 : interstitial
  1 : substitutional
  2 : vacancy
  3 : cluster
```

14. 첨자, 특수기호 등 특수 표현은 latex 표기법을 따른다.

예) $L1_{\{2\}}$ for $L1_2$;

https://en.wikipedia.org/wiki/Help:Displaying_a_formula#Functions,_symbols,_special_characters

(부록) 소재 데이터의 예 (가상의 데이터)

```
▼ 0 {4}
  ► meta {5}
  ► material_1 {5}
  ► material_2 {2}
  ► system {4}
```

각각의 데이터는 meta, materials_n, system 데이터 군으로 구성된다.

```
▼ meta {5}
  data ID : DOI:111.222.333.444
  data name : Pt3Ni particle on graphite support data 1
  ▼ contributor {2}
    name : Jung Hoon Lee
    affiliation : Computational Science Center, KIST
  data generation date : 2020-04-28
  note on data : information of material_2 comes from Aldrich
                  catalog\n10.1021/nl401881z
  ► material_1 {5}
  ► material_2 {2}
  ► system {4}
```

탄소를 지지체로 하는 Pt-Ni 나노입자 촉매 시스템의 데이터. meta 정보군 (meta) 과 두 개의 재료 정보군 (material_1 및 materials_2) 그리고 촉매시스템 정보군 (system) 으로 구성되어 있다.

Meta 정보군은 이 데이터에 관한 정보로서 data ID, data name, contributor, data generation date, note on data로 구성된다.

```

▼ meta {5}
  data ID : DOI:111.222.333.444
  data name : Pt3Ni particle on graphite support data 1
  ► contributor {2}
  data generation date : 2020-04-28
  note on      : information of material_2 comes from Aldrich
  data        : catalog\n10.1021/nl401881z
▼ material_1 {4}
  name : Pt3Ni
  ► chemical information {2}
  ► process [3]
  ► property {1}
▼ material_2 {2}
  name : C
  ► chemical information {1}
► system {4}

```

material_1과 material_2는 각각 Pt3Ni 나노입자 물질의 정보와 탄소 지지체 정보를 가진다. 각각의 재료는 화학 정보 (chemical information), 합성 공정 (process) 그리고 재료의 특성 (property)를 가지고 있다. 위의 예에서 materials_1은 화학 정보, 공정정보 그리고 재료 특성을 데이터로 갖고 있고, material_2는 화학 정보만을 갖고 있다.

```

▼ material_1 {4}
  name : Pt3Ni
  ▼ chemical information {2}
    ► composition {3}
    ► crystallography {3}
  ► process [3]
  ► property {1}
▼ material_2 {2}
  name : C
  ▼ chemical information {1}
    ► composition {2}

```

material_1의 화학 정보에는 조성 (composition)과 결정구조 (crystallography) 정보를 가지고 있고, materials_2는 조성 정보 만을 가지고 있다.

```

▼ material_1 {4}
  name : Pt3Ni
  ▼ chemical information {2}
    ▼ composition {3}
      Pt   : 75
      Ni   : 25
      unit : at.%
    ► crystallography {3}
  ► process [3]
  ► property {1}
▼ material_2 {2}
  name : C
  ▼ chemical information {1}
    ▼ composition {2}
      C    : 100
      unit : at.%

```

material_1의 조성은 Pt 75 at.%, Ni 25 at.% 이다. material_2의 화학조성은 100 at.% 탄소이다.

```

▼ material_1 {4}
  name : Pt3Ni
  ▼ chemical information {2}
    ► composition {3}
    ▼ crystallography {3}
      Bravis lattice : cubic
      ▼ lattice parameter {1}
        a : 3.897
      ▼ measurement [2]
        ▼ 0 {1}
          ▼ X-ray diffraction {2}
            instrument : PANalytical X'Pert PRO Alpha-1
                        diffractometer
            image : image_xrd.png
          ▼ 1 {1}
            ▼ TEM {2}
              instrument : JEOL ARM200F microscope
              image : image_tem.png
        ► process [3]
        ► property {1}
  ▼ material_2 {2}
    name : C
    ▼ chemical information {1}
      ► composition {2}
  ► system {4}

```

material_1의 결정구조는 cubic이며 lattice parameter는 3.897 Angstrom이다. 결정구조와 lattice parameter는 X-ray diffraction과 TEM으로 측정하였다. 다수의 측정조건은 measurement의 array로 저장된다. 측정의 조건과 미세조직 사진 혹은 spectrum은 각 분석데이터의 공통어휘에 맞추어 추가된다.

```
▼ material_1 {4}
  name : Pt3Ni
  ► chemical information {2}
  ▼ process [3]
    ▼ 0 {1}
      ► solvothermal {8}
    ▼ 1 {1}
      ► heat treatment {10}
    ▼ 2 {1}
      ► centrifugation {5}
  ► property {1}
▼ material_2 {2}
  name : C
  ▼ chemical information {1}
    ► composition {2}
  ► system {4}
```

material_1은 solvothermal 공정으로 합성한 뒤 열처리 공정과 원심분리 공정을 거쳐 만들어진다. 각 공정 object는 재료공정 공통어휘에 맞추어 작성되며, 공정 순서대로 process의 array로 저장된다.


```

▼ material_1 {4}
  name : Pt3Ni
  ► chemical information {2}
  ► process [3]
  ▼ property {1}
    ▼ structural property {3}
      ▼ morphology {1}
        ▼ particle {3}
          shape : octahedron
          ▼ size {1}
            ▼ diameter {2}
              value : 9
              uncertainty : 0.03
            ▼ measurement {1}
              ► TEM {2}
          ▼ 1D defect {5}
            type : edge dislocation
            Burgers vector : 1/3[110]
            ▼ density {2}
              value : 100000000
              uncertainty : 1000
            ▼ velocity {2}
              value : 9.2
              uncertainty : 0.05
            ▼ measurement {1}
              ► TEM {2}
          ► impurity {3}

```

material_1은 두 가지의 구조적 특성 데이터, 형상 (morphology)과 1차원 결함 (1D defect: dislocation) 및 impurity 데이터를 갖는다. 형상은 입자로서 octahedron 모양의 지름 9nm이며 TEM으로 관찰한 결과이다. 1D defect는 edge dislocation으로서 버거스벡터 $1/3[110]$, 밀도 $1e8/m^2$, 이동속도 9.2 m/sec 이다. 역시 TEM으로 관찰한 결과이다. 측정값의 불확도가 있는 경우에는 불확도 정보를 동반한다.

```
▼ material_1 {4}
  name : Pt3Ni
  ► chemical information {2}
  ► process [3]
  ▼ property {1}
    ▼ structural property {3}
      ► morphology {1}
      ► 1D defect {5}
      ▼ impurity {3}
        0 : 0.34
        unit : ppm
        uncertainty : 0.001
  ▼ material_2 {2}
    name : C
    ▼ chemical information {1}
      ► composition {2}
  ► system {4}
```

Materials_1의 impurity는 산소 0.34 ppm이 존재하며, 측정값의 불확도는 0.001 ppm이다.

```

▼ meta {5}
  data ID : DOI:111.222.333.444
  data name : Pt3Ni particle on graphite support data 1
  ► contributor {2}
  data generation date : 2020-04-28
  note on      : information of material_2 comes from Aldrich
  data         : catalog\n10.1021/nl401881z
  ► material_1 {4}
  ► material_2 {2}
▼ system {4}
  description : Pt3Ni/C catalyst system for CO2 reduction
  ► configuration {3}
  ► process [3]
  ► performance {1}

```

material system 정보는 description, configuration, process 그리고 performance로 구성된다. description에서는 materials system에 대한 간략한 설명을 포함한다. configuration은 material_1와 material_2가 어떻게 material system을 구성하는지를 기술한다. process는 재료의 공정과 마찬가지로 material system을 구축하는 공정을 순차적으로 기술한다. performance는 재료 시스템의 성능을 기술한다. configuration과 performance 정보군은 관찰하고자 하는 재료의 활용조건에 따라 고유한 구조와 어휘를 가진다.

```

▼ system {4}
  description : Pt3Ni/C catalyst system for CO2 reduction
  ▼ configuration {3}
    active material : Material_1
    amount of active material : 0.003
    support material : Material_2
  ► process [3]
  ► performance {1}

```

이 시스템의 active material은 Material_1 (Pt3Ni) 이고 support material은 Material_2 (carbon) 이다. 이 시스템에서 active material 대 support material의 비율은 0.003이다.

```

▼ system {4}
  description : Pt3Ni/C catalyst system for CO2 reduction
  ► configuration {3}
  ▼ process [3]
    ▼ 0 {1}
      ► sonication {4}
    ▼ 1 {1}
      ► centrifugation {4}
    ▼ 2 {1}
      ► rinsing {3}
  ► performance {1}

```

이 시스템의 제조를 위해 sonication, centrifugation 그리고 rinsing 공정이 사용되었다. 각 공정의 데이터는 소재공정 공통어휘에 맞추어 구성되었다. (아래 참조)

```

▼ process [3]
  ▼ 0 {1}
    ▼ sonication {4}
      ▼ material mix {2}
        Material_1 : 0.02
        Material_2 : 0.03
        solvent : toluene
        temperature : 298
        time : 3
      ▼ 1 {1}
        ▼ centrifugation {4}
          revolutions per minute : 12000
          time : 10
          temperature : 333
          ▼ additive_1 {2}
            name : acetic acid
            amount : 0.02
        ▼ 2 {1}
          ▼ rinsing {3}
            temperature : 343
            time : 0.5
          ▼ additive_1 {1}
            name : ethanol

```

```
▼ system {4}
  description : Pt3Ni/C catalyst system for CO2 reduction
  ► configuration {3}
  ► process [3]
  ▼ performance {1}
    ▼ electrochemical {1}
      ▼ ORR {3}
        ► area-specific activity {3}
        ► mass-specific activity {3}
        ► Faradaic efficiency {3}
```

촉매로서의 electrochemical 성능의 측정은 ORR 데이터를 제공한다. area-specific activity, mass-specific activity 그리고 Faradaic efficiency 데이터를 제공하며 각 데이터는 데이터 값과 측정 조건 데이터를 가진다. 측정조건 데이터는 분석방법 공통어휘에 맞추어 작성된다. (아래 참조)

```
▼ performance {1}
  ▼ electrochemical {1}
    ▼ ORR {3}
      ▼ area-specific activity {3}
        value : 49
        uncertainty : 0.1
      ▼ measurement {1}
        ▼ electrochemical activity {5}
          instrument : CHI 730C potentiostat
          temperature : 298
          voltage : 0.9
          graph image : image_electro_chem.png
          analysis method : potentiostat
      ▼ mass-specific activity {3}
        value : 0.4
        uncertainty : 0.001
      ▼ measurement {1}
        ▼ electrochemical activity {5}
          instrument : CHI 730C potentiostat
          temperature : 298
          voltage : 0.9
          graph image : image_electro_chem.png
          analysis method : potentiostat
    ▼ Faradaic efficiency {3}
      value : 90
      uncertainty : 0.5
      ▼ measurement {1}
        ▼ gas chromatography {6}
          instrument : CHI 730C potentiostat
          flow rate : 5
          temperature : 298
          voltage : 0.9
          graph image : image_electro_chem.png
          analysis method : gas chromatography
```