

Databáze v chemické a forenzní analýze

Tereza Uhlíková

2. dubna 2024

Tereza Uhlíková

Ústav analytické chemie

skupina teoretické spektroskopie

místnost A277

<https://web.vscht.cz/~uhlikovt/>

tereza.uhlikova@vscht.cz

O čem to bude

1	19.3.	Opakování databází, normalizace, ERA
2	26.3.	Spektroskopické databáze - atmosférické, vesmírné
3	2.4.	NIST,specDB
4	9.4.	MS, NMR, krystalografické
5	16.4.	AI a Kvantové počítače pro práci s daty
6	23.4.	Barvy, laky, sklo, textilie
7	30.4.	Půda, hořlaviny, nukleární materiály
8	7.5.	STŘEDEČNÍ ROZVRH = NENÍ PŘEDNÁŠKA
9	14.5.	Toxikologické
10	21.5.	Zkouška

cvičení: společná databáze volně prodejných psychotropních látek

- Pro všechny platí - nejdůležitější je si přečíst **návod**

(jak se používá, jaké jsou jednotky, jak se značí přechody, jaké je rozlišení, v čem se měřilo)

- rozmyslet si **otázku**, co vlastně hledám

(informací je mnoho, ale která je ta správná) – HITRAN x Cologne – přesné linie x sp. konstanty

- použít **různé** přístupy/otázky

(jméno amoniak x čpavek, frekvence přechodu – rozmezí, intenzita, disociace)

- dohledání **autora**, zdroje (citace u spekter)
- používat **různé** databáze

(od různých lidí, z různých zemí)

- **obnovené** (přeměření spektra se přechod přiřadí jinému kv. číslu NO_3) - ale i **staré** verze (čím více dat tím více chyb)
- spousty, ale dost se překrývají (HITRAN x GEISA)
- jedna centrální neexistuje
- někdy lze použít i nepublikované

High-resolution TRANsmission molecular absorption database

<https://hitran.org/>

- Nejen soupis molekul, ale i jejich vlastností – specializované
- Části, aneb co je důležité pro atmosféru:
 - 1 soupis linií z vysoce rozlišené IR a mikrovlnné spektroskopie + intenzity
 - 2 infračervené absorpční průřezy (pro velmi hustá spektra)
 - 3 soupis linií a průřezů pro UV oblast
 - 4 index lomu aerosolů
 - 5 srážková absorpce
 - 6 obecná data a software pro filtrování a kompilaci

- Kdo ji tvoří?

Dr Laurence S. Rothman - zakladatel v 60-tých letech

- Proč ji tvoří?

chemické složení a možné reakce v atmosféře a ve vesmíru

- Komu slouží?

všem...

- Kolik stojí? & Kolik pracujících lidí?

různé laboratoře (desítky) dodávají naměřená spektra

- Jací lidé jsou potřeba?

odborní spektroskopici - experimentátoři i teoretici + programátoři
databází

- Kolik času?

- Jak je veliká?

celá databáze má velikost cca 10 GB

- Kolik molekul?

55 molekul a jejich izotopologů

- kolik experimentálních linií?
- kolik predikcí?

Jednotky (nejen SI, opět specializované)

Měřeno ve vakuu, vzduchu (popř. vodě, rozpouštědle, tuhé fázi, jako pára)

Jaká chyba měření

...

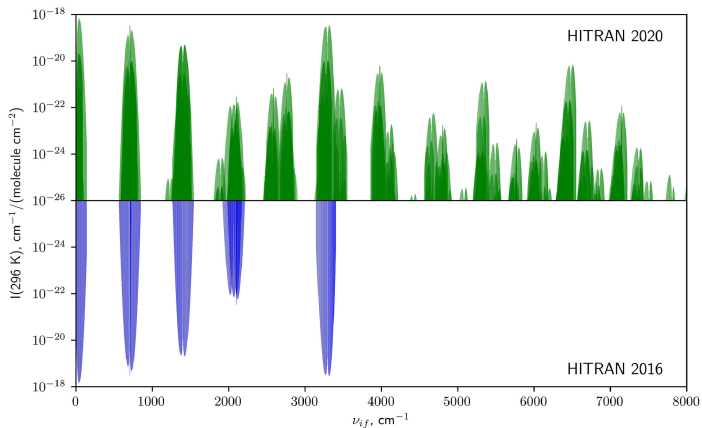
Updated bands for $^{16}\text{O}_3$.

Band	Number of lines	Spectral range (cm^{-1})	S_ν	References for ν , S
022-000	1336	3297.46-3478.53	9.936	[71,71]
121-000	1611	3383.04-3483.38	62.720	[71,71]
113-100	658	3490.53-3565.76	4.038	[72,71]
014-001	1136	3520.70-3605.15	12.251	[72,71]
014-100	13	3533.85-3562.08	0.029	[72,71]
113-001	12	3543.34-3604.91	0.036	[72,71]
213-000 ^a	954	5447.73-5526.30	9.627	[71,71]

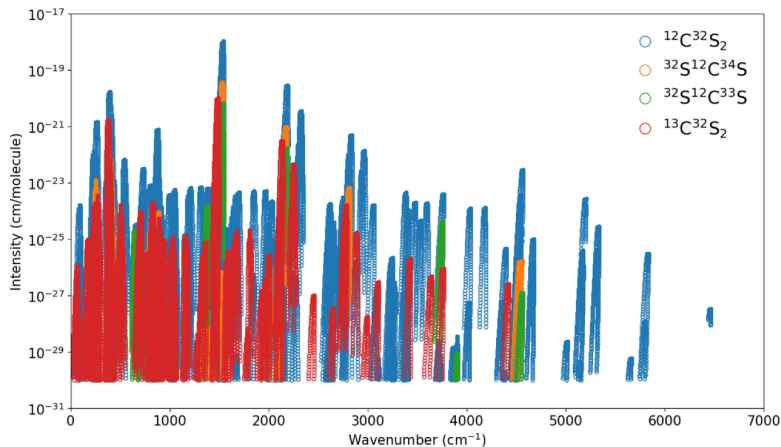
Note: S_ν is the sum of line intensities in units of $10^{-23} \text{ cm}^{-1}/(\text{molecule cm}^{-2})$ at 296 K for the corresponding bands included in the line list, ν is the line position, and S is the line intensity.

^a This band was labeled as 015-000 in the previous version of HITRAN.

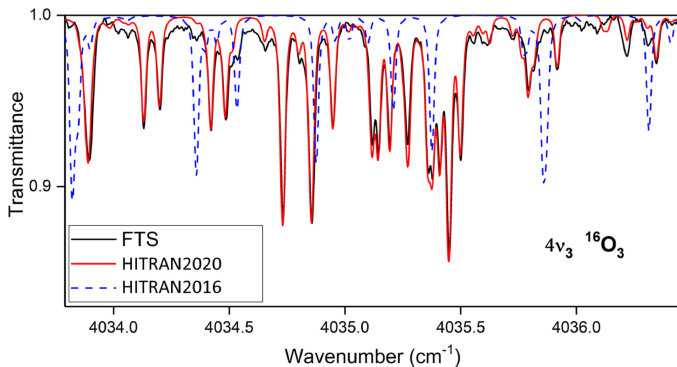
HITRAN data



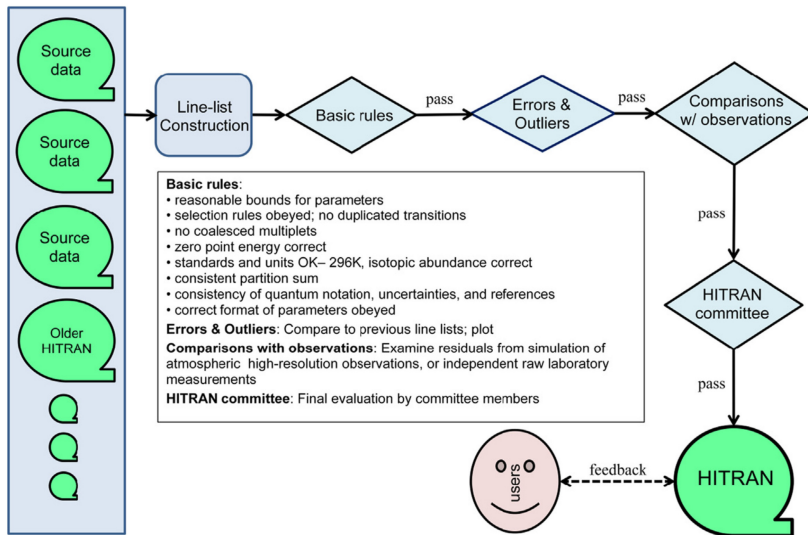
HITRAN data



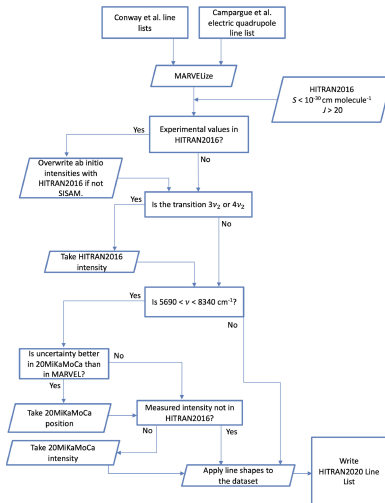
Výpočet transmittance v okolí 4000 cm^{-1} použitím S&MPO_20d (HITRAN2020). Srovnání výpočtu predikcí HITRAN2016 A HITRAN2020 a experimentu.

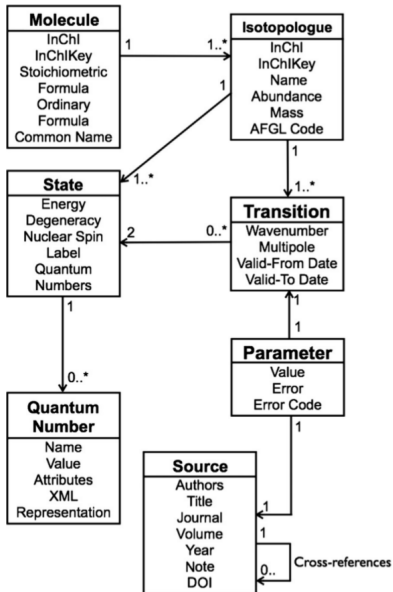


HITRAN vnější mašinérie



Získání intenzit konzistentních s Hitranem 2020





- Gestion et Etude des Informations Spectroscopiques Atmosphériques: Management and Study of Spectroscopic Information

<https://geisa.aeris-data.fr/>

- založena v roce 1974
- publikována Chédin et al. v roce 1982
- Data pro výpočet zářivých přehodů
- <https://geisa.aeris-data.fr/interactive-access/?db=2015&info=database>

CDMS - Koeln

Molecules in the Interstellar Medium or Circumstellar Shells

[https://cdms.astro.uni-koeln.de/classic/predictions/daten/
Cyanamide/](https://cdms.astro.uni-koeln.de/classic/predictions/daten/Cyanamide/)

[https://cdms.astro.uni-koeln.de/classic/predictions/pdfs/
CDMS_AA.pdf](https://cdms.astro.uni-koeln.de/classic/predictions/pdfs/CDMS_AA.pdf)