

Databáze v chemické a forenzní analýze

Tereza Uhlíková, tereza.uhlikova@vscht.cz

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

NIST - National Institute of Standards and Technology

<http://www.nist.gov/>

Stránky celého institutu pro standard – nejen databáze, dělají i výzkum a vše standardizují - základní veličiny, podle čeho se má měřit a kalibrovat přístroje

Otevřená (prozatím), placená z daní USA, databáze v rámci jednotlivých ústavů 2017 rozpočet byl \$1 000 million \times 25 = 25 miliard Kč CR má 1 250.9 miliard Kč

<https://www.nist.gov/about-nist/our-organization/budget-planning>

Seznam volně přístupných databází v NISTu

Free Standard Reference Databases by SRD Number

<http://www.nist.gov/srd/onlinelist.cfm>

Jejich popis

<http://srdata.nist.gov/gateway/gateway?dblist=1>

Nás jako chemiky zajímá zejména chemická spektroskopická data

<http://webbook.nist.gov/>

Databáze obsahuje zejména organické sloučeniny a několik malých anorganických, pouze takové pro které mají v NIST data.

Forezní portál

<http://www.nist.gov/forensics-portal.cfm>

<http://webbook.nist.gov/>

- Termochemická data pro více jak 7000 organických sloučenin
- IČ spektra pro 16000 Hmotnostní spektra pro 33000
- UV/Vis spektra pro 1600
- Data pro plynovou chromatografii pro 27000
- Electronická a vibrační spektra pro 5000
- Spektroskopické konstanty pro 600 diatomik (Herzberg - 1960)
- Ionizační energie pro 16000
- Termofyzikální vlastnosti pro 74 kapalin

<http://webbook.nist.gov/chemistry>

Možnosti hledání: přímé

Vzorec

Jméno

katalogové číslo

Ionizační energie

Elektronová afinita

Protonová afinita

Kyselost

Energie vzniku produktů

Vibrační energie a Elektronická energie

Nakreslená struktura Struktura v souboru

Třída struktur

Molekulová hmotnost

Reakce

Autor

Možnosti hledání: nepřímé

Doklikat se

- Vzorec – nezávisí na pořadí, mezerách, velikostech $nO \times No$,? - jakýkoli atom, možnost přidat libovolný atom (opatrně), izotopolog, větší počet atomů
- Jméno - nezávisí na pořadí, mezerách, velikostech,* - neúplné
- katalogové číslo
- Ionová energie
 - Ionizační energie – eV, rozmezí (není pro všechny sloučeniny)
 - Elektronová afinita – stejné jako IE
 - Protonová afinita – stejné jako IE
 - Kyselost – definice – gibbspva volná energie
 - Energie vzniku produktů – struktura často není známa—pouze vzorec
- Vibrační a elektronová spektra
 - Vibrační energie - vlnočet
 - Elektronická energie

- Struktura
 - Applet Based Structure Search - přímo se nakreslí
 - File Based Structure Search - nahrát soubor
 - Structure Class Search - charakterizuje se struktúra podle vazeb, atomů, kruhů...
- Molekulová hmotnost - nejvíce zastoupený izotop
- Reakce - přímá reakce
- Autor - reference

Jednotky – SI nebo založené na kalorií (kalorie a atmosféra místo Joule a bar)

Typy dat, která se obdrží: - když se nic nezvolí, zobrazí se pouze základní informace

- temochemická data
 - plyná fáze
 - kondenzovaná fáze
 - fázová přeměna
 - reakce
 - ionizační energie
 - energie pro tvoření iontových klastrů
- ostatní data
 - IR spektra
 - hmotnostní spektra
 - UV/Vis spektra
 - vibrační a elektronová spektra
 - konstanty dvoutatomových molekul - vibrační, rotační a rotačně-vibrační
 - Henryho zákon - udává souvislost parciálního tlaku páry dané látky nad roztokem a jejího podílu v tomto roztoku

Jak data vypadají

<http://webbook.nist.gov/chemistry/form-ser.html>

Tabulky: společné rysy – více kodů (text, html, pdf, ascii), reference, komentáře

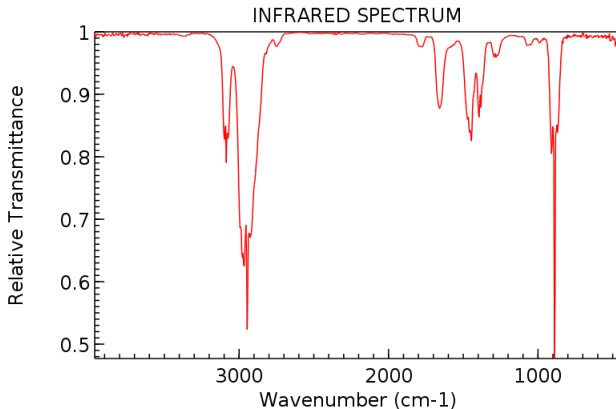
Grafy: Java

Spektra: online x applet

Vyzkoušíme C₆H₆ – není pouze benzen

<https://webbook.nist.gov/cgi/cbook.cgi?Formula=C6H6&NoIon=on&Units=SI>

Čemu náleží toto spektrum - první pík je 3086 cm^{-1}



NIST Chemistry WebBook (<http://webbook.nist.gov/chemistry>)

Atomová databáze <http://www.nist.gov/pml/data/asd.cfm>

jsou dány ve viditelné oblasti tyto linie v nm ve vzduchu,

648.14 |

648.44 |

651.73 |

653.00 |

655.12 |

Jaké mu prvku náleží a vygenerujte celé spektrum

SpecDB = Specification Database Design

<https://britastro.org/specdb/>

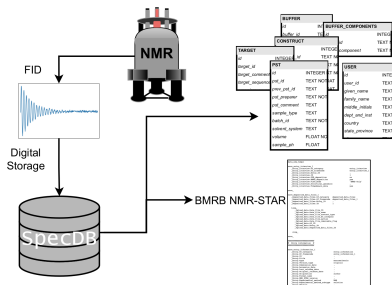
<https://github.com/markasoftware/SpecDB>

<https://specdb.readthedocs.io/en/latest/>

<https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/2018AAS...23136215K/abstract>

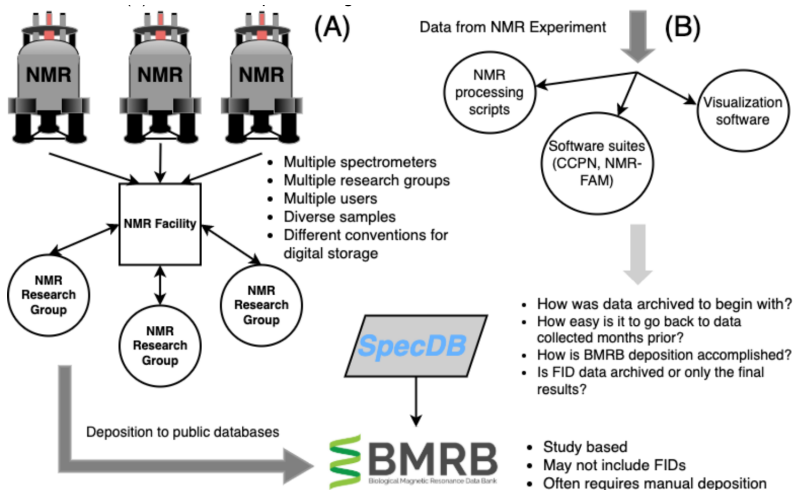
https://link.springer.com/chapter/10.1007/11676935_29

<https://doi.org/10.1016/j.jmr.2022.107268>

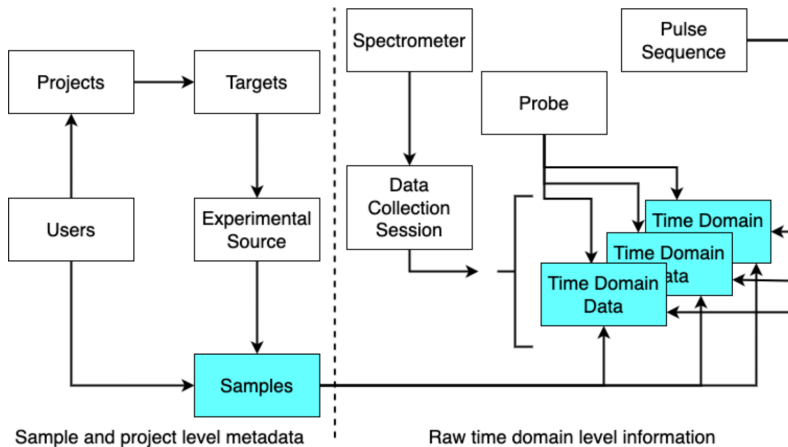


<https://doi.org/10.1016/j.jmr.2022.107268>

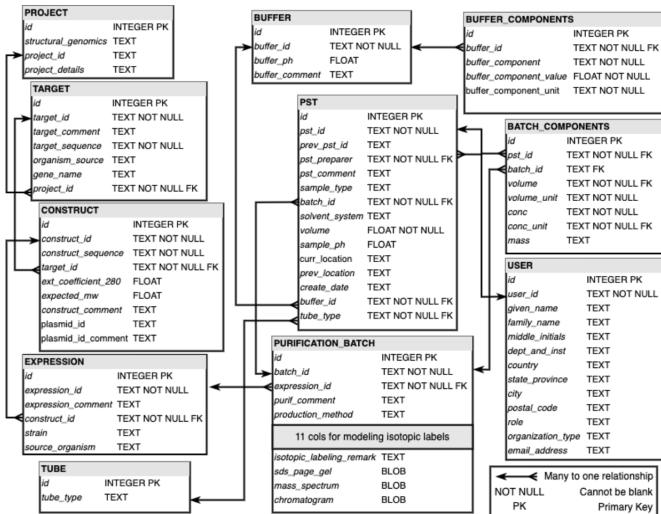
Data ecosystem



SpecDB dvoukřídlové schéma



Relační diagram I



Relační diagram II

