

Rautalankamalleja ainearvohakuihin STN-tietopankissa

Riitta Housh

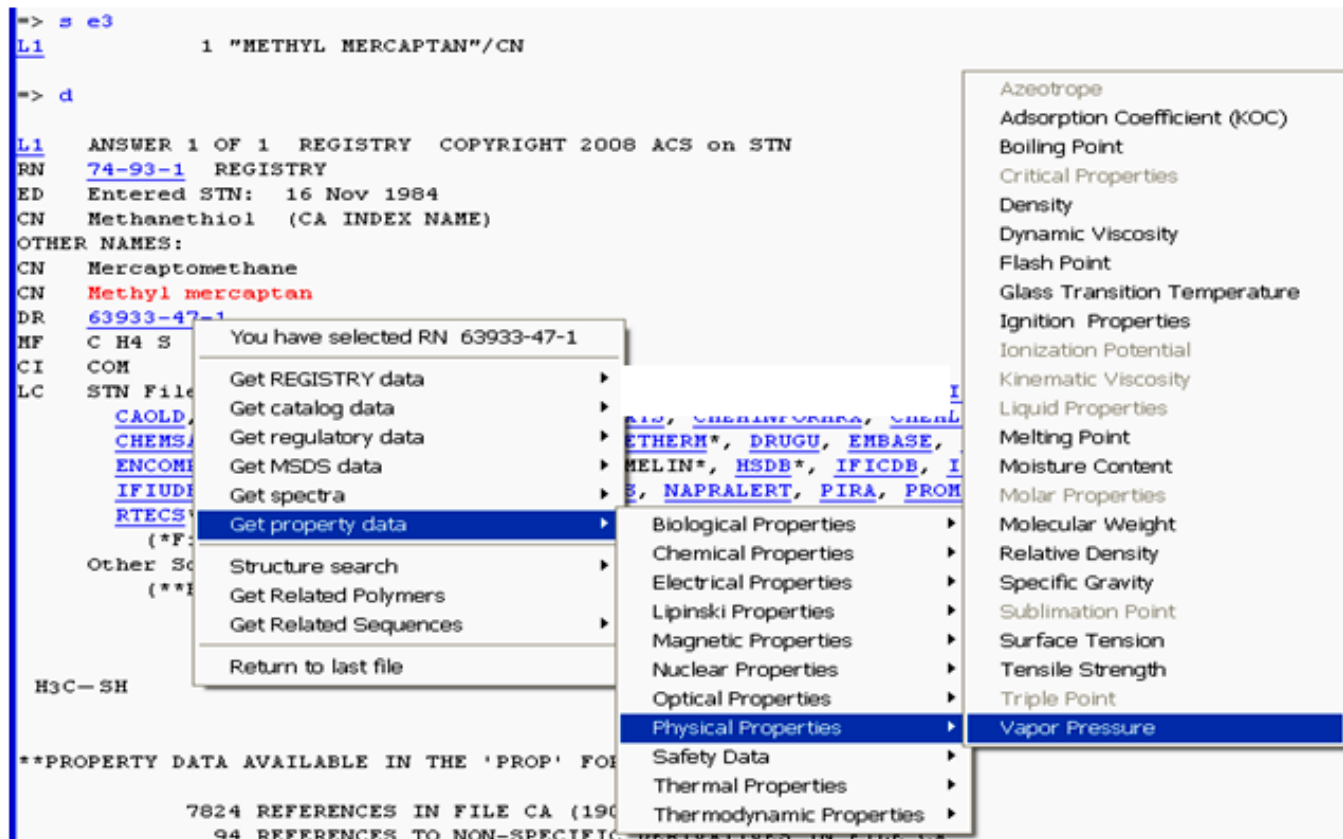
6.8.2013

STN:n numeeriset tietokannat ominaisuusarvojen hakuun

<u>Tietokanta</u>	<u>Aineita</u>	<u>Tietueita</u>	<u>Vuo- desta</u>	<u>Yhdisteet</u>	<u>Sisältö - ominaisuudet</u>
REGISTRY	65 milj (130 milj.)	65 milj. (130 milj.)	1907	Kaikki	2 miljardia kokeellista ja laskennallista ominaisuusarvoa
REAXYSFILE	20 milj.	20 milj.	1771	Org. ja epäorg. aineet	Fysikaalisia, termodynaamisia ja EcoPharm-ominaisuuksia, spektrejä, reaktioita, patenteja ym.
CHEMSAFE	1 500	47 000		Palavat kaasut, nesteet, seokset	40 turvallisuusteknistä ominaisuutta
DETERM	20 000 + seoksia	750 000 taulukkoa, 47000 lähdettä	1819	Epäorg. ja org. aineet, paljon seoksia	500 termofysikaalista ominaisuutta
ICSD		135 000	1913	Epäorg. yhdisteet	Rakenneparametrit
RTECS	176 000	176 000	1971	Org. ja epäorg. aineet	Toksisuus

Ominaisuustietojen haku STN Expressin automaattitoiminnon avulla

- Klikkaa yhdisteen CAS-numeroa hiiren vasemmalla painikkeella minkä



The screenshot shows the STN Express interface with a search for 'METHYL MERCAPTAN'. The search results display the compound name, CAS number (63933-47-1), and other identifiers. A context menu is open over the CAS number, listing various data sources and property categories. The 'Physical Properties' category is selected, and a sub-menu is visible showing 'Vapor Pressure' as the selected property.

```

=> s e3
L1 1 "METHYL MERCAPTAN"/CN
=> d
L1 ANSWER 1 OF 1 REGISTRY COPYRIGHT 2008 ACS on STN
RN 74-93-1 REGISTRY
ED Entered STN: 16 Nov 1984
CN Methanethiol (CA INDEX NAME)
OTHER NAMES:
CN Mercaptomethane
CN Methyl mercaptan
DR 63933-47-1
MF C H4 S
CI COM
LC STN File
  CAOLD,
  CHEM*,
  ENCOM,
  IFIUD,
  RTECS
  (*F:
  Other Sc
  (**
  H3C-SH
  **PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FO
  7824 REFERENCES IN FILE CA (190
  94 REFERENCES TO NON-SPECIFIC DERIVATIVES IN FILE CA
  
```

Context menu options:

- You have selected RN 63933-47-1
- Get REGISTRY data
- Get catalog data
- Get regulatory data
- Get MSDS data
- Get spectra
- Get property data
- Structure search
- Get Related Polymers
- Get Related Sequences
- Return to last file

Property categories:

- Biological Properties
- Chemical Properties
- Electrical Properties
- Lipinski Properties
- Magnetic Properties
- Nuclear Properties
- Optical Properties
- Physical Properties
- Safety Data
- Thermal Properties
- Thermodynamic Properties

Selected property: Vapor Pressure

- Klikkaa sitten haluamaasi ominaisuutta. STN hakee ja tulostaa tiedot automaattisesti. Vastaa vain kysymyksiin

REGISTRY

- Hae yhdisteen tietue REGISTRYssä
- Tulosta sen FA-kenttä (Field Availability) **D FA**
=> Lista yhdisteelle saatavista ominaisuuksista
- Tulosta sen perusteella (jokaisen hinta 1,06 euroa)
 - **D PROP** kaikki ominaisuudet
 - **D EPROP** experimental (arvot Registryssä)
 - **D PPROP** predicted
 - **D CALC** calculated
 - **D ETAG** experimental property tags (tiedot CAplussassa)

 - **D HVAP** yms vain yksi ominaisuus
- **Älä koskaan tulosta Registryssä D ALL!**

ReaxysFile, MCRK, RTECS

- Hae ja tulosta yhdisteen tietue REGISTRYssä ja tulosta sen tietue.
- LC (Locator)-kenttä kertoo, missä tietokannoissa yhdisteelle on tietoja haettavissa CAS-numeron avulla.
- Mene näihin tietokantoihin ja tee niissä haku Registryn joukkonumeron avulla **S L1**. Jos ReaxysFilessä vastaus 0, niin etsi yhdistettä ReaxysFilen CN-kentästä
- Vaihtoehto 1
 - Tulosta tietue heti pelkällä **D**:llä
 - Tutki FA-kenttää **D FA** ja tulosta kiinnostavat tiedot kenttäkoodin avulla, **D BP**
Käytä ReaxysFilessä superkenttiä => samalla yksikköhinnalla useita kenttiä, **D ECO**
- Vaihtoehto 2
 - Selvitä, missä kentissä etsimäsi tieto on hakemalla **E VAPOR/FA** tai etsi etukäteen tietokannan kuvailusivuilta.
 - Yhdistä löytynyt ominaisuus yhdisteen tietueeseen ja tulosta kuten edellä **S L1 AND VP/FA; D VP** tai pelkkä **D S L1 AND ECO/FA; D ECO** tai pelkkä **D**
- **Älä koskaan tulosta ominaisuustietokannoissa D ALL!**

Monikomponenttihaku ReaxysFilessä –1. tapa

- Hae ReaxysFilen kuvailusivuilta etsimäsi ominaisuuden ja sen parametrien kenttätunnukset
- Hae yhden komponentin A tietue
S ETHANOL/CN => L1
- Hae toinen komponentti B Partner-parametrikentästä (/xx.PA)
S TRITON X-100/ADSM.PA => L2
- Jos komponentteja on useita, yhdistä ne toisiinsa (P)-operaattorilla
S (BENZENE(P)WATER)/AZE.PA => L2
- Yhdistä ominaisuus ANDilla yhdisteen tietueeseen
S L1 AND L2
- Tulosta normaalisti
D AZE

Monikomponenttihaku ReaxysFilessä - 2. tapa

- Hae ReaxysFilen kuvailusivuilta etsimäsi ominaisuuden ja sen parametrien kenttätunnukset
- Hae yhden komponentin A tietue
S VANILLIN/CN => L1
- Hae toisen komponentin B tietue
S SALICYLIC ACID/CN => L2
Poimi tietueesta komponentin B tietuenumero
SEL AN 1
Tulosta numero
D SEL E1
Hae numero etsityn ominaisuuden Partner-tietue –parametrikentästä (/xx.PAAN)
S 774890/LSSM.PAAN => L3
- Yhdistä saatu L-joukko ANDilla pääkomponentin tietueeseen
S L1 AND L3

DEThERM/CHEMSAFE

- Selvitä, missä kentässä ominaisuus on
- Hae yhdisteen/yhdisteiden tietueet Registryssä **S L1 ja S L2**
- Hae sitten DETHERM/CHEMSAFE Registryn joukkonumeroidenn avulla
=> **L3 ja L4**
- Rajaa haku komponenttien lukumäärällä NC = Number of Components
S L3 AND L4 AND NC=2 => L5
- Hae ominaisuus PROP-kentästä
E VAPOR PRESS/PROP; S E# => L6
- Yhdistä aine- ja ominaisuushaut
S L5 AND L6
- Tulosta maksuttomalla **D TRIAL**
- Tarkista hinnasto **HELP COST**
- Tulosta haluamasi viitteet kokonaan **D ALL 2-4, 8,15**
tai vain bibliografiset tiedot **D BIB**

Numeerisissa tietokannoissa käytetyt erikoismerkinnot

- Desimaalipilkku on piste

4,78 \Rightarrow **4.78**

- Potenssiluvut: [numeroarvo] E [kymmenen potenssi]

204 = 2,04 10² \Rightarrow **2.04E2** tai **2.04E02**

0,68 = 6,08 10⁻¹ \Rightarrow **6.08E-1**

8,36 10⁻⁵ \Rightarrow **8.36E-5**

- Potenssimerkinnät yksiköissä: [yksikkö]**[potenssi]

N/m² \Rightarrow **N/m**2**

- Peräkkäiset perusyksiköt erotetaan toisistaan tähdellä (*)

mPa s \Rightarrow **mPa*s**

Millä aineilla on halutut ominaisuudet?

Rautalantamalli hakuun ominaisuusarvojen mukaan

- Tutki ensin tietokannan kuvailusivuja.
 - Missä tietokannassa on haluamasi ominaisuudet?
 - Voiko niitä hakea numeerisesti?
 - Katso oletusyksiköt
 - Tutki hakuesimerkkejä
- Haku
 - Kenttätunnukseksi ominaisuuskenttä
 - Etsityt arvot hakukomentoon numeeristen operaattoreiden avulla $>$, $>=$, $=$, $<=$, $<$
 - Merkitse yksikkö, jos se ei ole oletusyksikkö ominaisuuskentässä
 - Käytä tarvittaessa lisänä lämpötila-, paine- ym. parametrejä
- Tulostus
 - Yleensä pelkkä **D** riittää. Se antaa ne tiedot, joilla tietue löytyi.

Numeeriset operaattorit

- Numeeriset operaattorit $>$, \geq , $=$, \leq ja $<$
 - **S DEN** $>$ **1,45** tai **S VS** $<$ **0,003** tai **300 K/TEMP** tai **TEMP=300 K**
 - Vältä numeerisissa hauissa täsmällistä arvoa (**S TEMP=50**), koska silloin saat vain ne tietueet, joissa on juuri tämä arvo.
 - Haku ei löydä tietuetta, jossa arvo on hiukankaan poikkeava (**50,01**)
 - Tosin haku kyllä löytää myös ne tietueet, joissa arvoksi on annettu väli (**45-75**) ja joissa on avoin loppu (**>40**), jos haettu arvo sisältyy näihin.
 - Mieti siis tarkkaan, mitkä arvot kelpaavat ja käytä haussa mieluiten väliä (**S 22-24 C/TEMP**) tai avointa määrettä (**>40**)

Haussa käytettävä yksikkö

- Jos käytät oletusyksikköä, niin yksikköä ei tarvitse merkitä **S 100/MP**
- Jos käytät muuta yksikköä, niin yksikkö pitää kirjoittaa hakukomentoon numeroarvon jälkeen **S 123 C/MP**
- Tarkista aina, mitä yksikköä STN käytti haussa
- Tulostuksessa STN käyttää aina oletusyksikköä
- Kaikki oletusyksiköt voidaan muuttaa tietyn järjestelmän mukaisiksi sekä haussa että tulostuksessa

SET UNITS ALL=MKS (MKS-järjestelmä)

SET UNITS ALL=SI (SI-järjestelmä)

SET UNIT ALL= (Oletusjärjestelmä)

Pysyvä muutos, kun lisäät **PERM**

	SI	MKS	CGS
Pituus	m	m	cm
Paino	kg	kg	g
Aika	s	s	s
Lämpötila	K	°C	°C
Energia	J	J	cal

Lämpötilasta, paineesta ym. parametreista riippuvat ominaisuudet

- Joskus ominaisuuksien arvot on annettu taulukoissa lämpötilan, paineen tai muiden parametrien funktioina
- DETHERMissä ja CHEMSAFEssä parametreilla omia hakukenttiä
 - läm-pötila **TEMP**
 - paine **PRES**
 - mooliosuus**XL**
- Muissa tietokannoissa parametrien kenttätunnukset saadaan pistämällä haettavan ominaisuuden kenttätunnuksen perään piste (.) ja sen jälkeen parametria kuvaava kirjain
 - läm-pötila **.T** esim. **DV.T**
 - paine **.P** esim. **DV.P**
- Käytä **(P)**-operaattoria aina, kun teet haun ominaisuuden ja sen parametrin arvolla. Silloin hakemasi arvot ovat samalla taulukkorivillä.
 - AND antaa myös sellaisia taulukoita, joissa ylipäättänsä on haettu ominaisuusarvo ja haettu lämpötila tai paine, mutta ne eivät kuulu yhteen (= eivät ole samalla taulukkorivillä).