

混合状態での物性値の検索方法

Question : 混合状態での物性値を検索する方法はありますか？

Answer : Advance 検索で混合状態を構成する化合物を指定して検索できます。

(有機化合物の場合) :

検索例 : エタノールをパートナーとしたクロロホルムとの混合状態の、物性値を検索する

Step 1 - 7

混合状態の検索式を作成する。

「Properties (Advanced)」

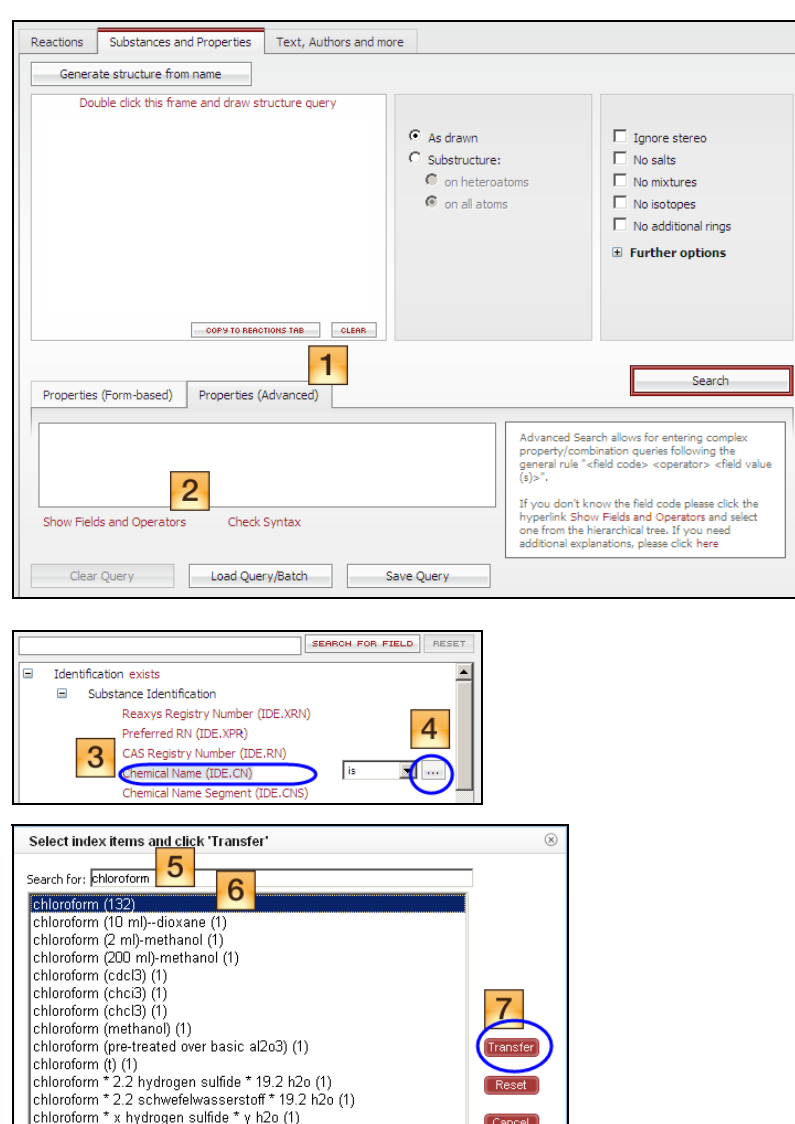
>「Show Fields and Operators」

>「Identification」

>「Substance Identification」

>「Chemical Name」

を選択し、「…」をクリックして、化合物名を「chloroform」と入力する。



The screenshot illustrates the steps to create a search query for a mixed state. It shows the 'Properties (Advanced)' section where the search field is used to enter the compound name. The 'Identification exists' dropdown menu is used to select the 'Chemical Name (IDE,CN)' field. The search results list shows various chloroform entries, and the 'Transfer' button is used to add the selected entry to the search query.

Step 8 - 13

パートナーとなる化合物を指定する。

「Properties (Advanced)」

>「Show Fields and Operators」

>「Physical Data」

>「Liquid/Liquid Systems (MCS)」

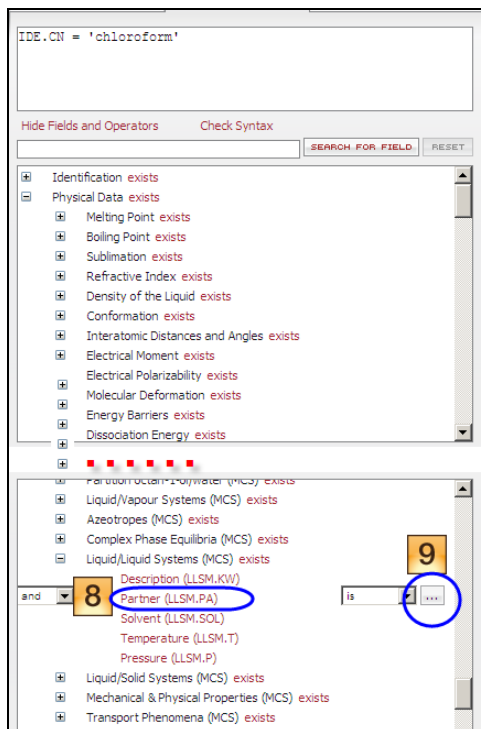
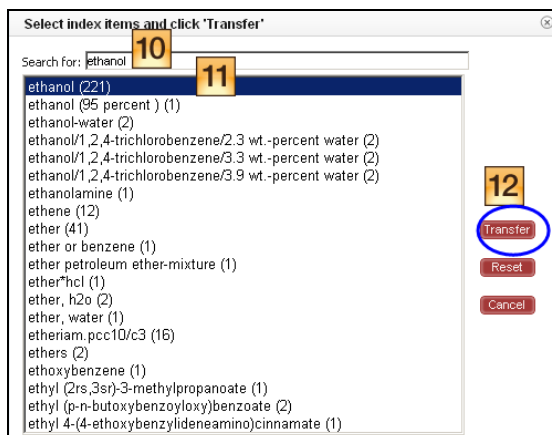
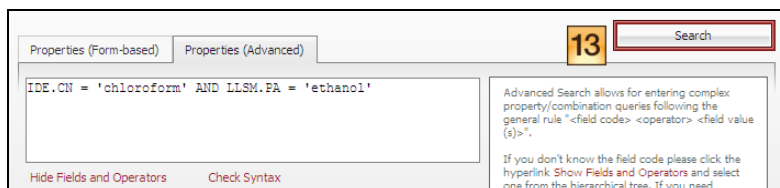
>「Partner」

を選択し、「…」をクリックして、化合物名を「ethanol」と入力する。

表示された候補リスト一番上の

「ethanol (221)」を選択して、「Transfer」ボタンをクリックする。

「LLSM.PA = 'ethanol'」という検索式が表示される。

Step 14

Step 13 で入力した検索式を用いて、

「Search」ボタンをクリックする。

検索結果画面が表示され、「Hit Data」の
 下の矢印をクリックすると、検索条件を満た
 すレコードが表示される。

(※ 相図を確認するには、出典文献のフル
 テキストにアクセスする。)

Description	Partner	Solvent	Temperature	Reference
Liquid/liquid phase diagram	butan-1-ol ethanol	H2O	25 °C	Nagata, Isamu; Tamara, Kazuhiro; Yamada, Tohru Journal of Solution Chemistry, 1996 , vol. 25, # 6 p. 567 - 588 Title/Abstract Full Text View citing articles Show Details
Liquid/liquid phase diagram	ethanol water		25 °C	Moriyoshi, Takashi; Uosaki, Yasuhiro; Sakamoto, Takashi Journal of Chemical Thermodynamics, 1988 , vol. 20, # 5 p. 589 - 594 Title/Abstract Full Text View citing articles Show Details
Liquid/liquid phase diagram	ethanol toluene H2O		25 °C	Ruiz, Francisco; Prats, Daniel; Gomis, Vicente Journal of Chemical & Engineering Data, 1985 , vol. 30, # 4 p. 412 - 416 Title/Abstract Full Text View citing articles Show Details
Liquid/liquid phase diagram	ethanol butan-1-ol	H2O	25 °C	Roach, Mark; Van Ness, Hendrick C. Journal of Chemical & Engineering Data, 1984 , vol. 29, # 2 p. 181 - 183 Title/Abstract Full Text View citing articles Show Details
Liquid/liquid phase diagram	ethanol	H2O	25 °C	Roach, Mark; Van Ness, Hendrick C. Journal of Chemical & Engineering Data, 1984 , vol. 29, # 2 p. 181 - 183 Title/Abstract Full Text View citing articles Show Details
Liquid/liquid phase diagram	water ethanol		0 °C	Bonner Journal of Physical Chemistry, 1910 , vol. 14, p. 755 Full Text Show Details

(注)

混合状態を構成する化合物のうち、検索対象として指定する化合物は、構造式・物質名のどちらでも入力
 できます。パートナーとなる化合物は、物質名でのみ入力が可能です。

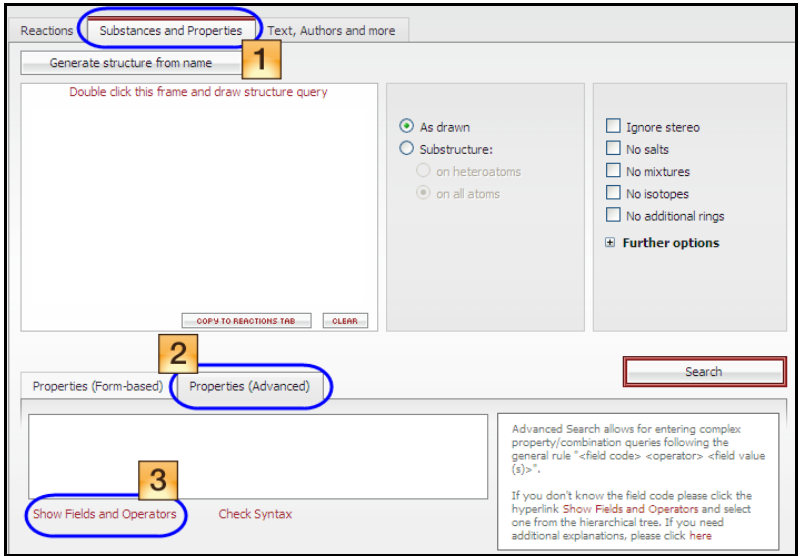
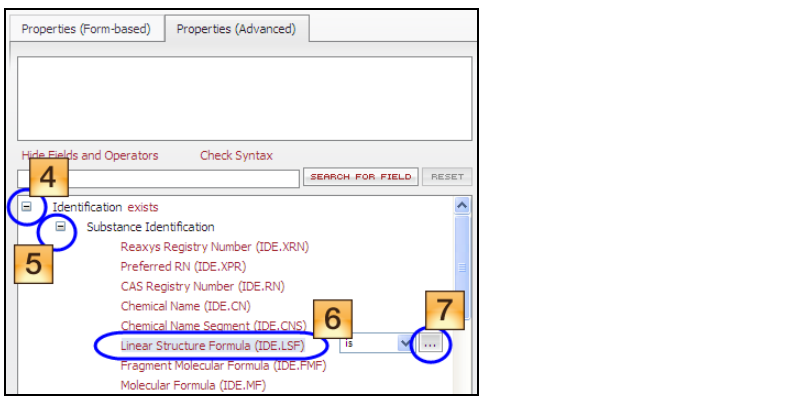
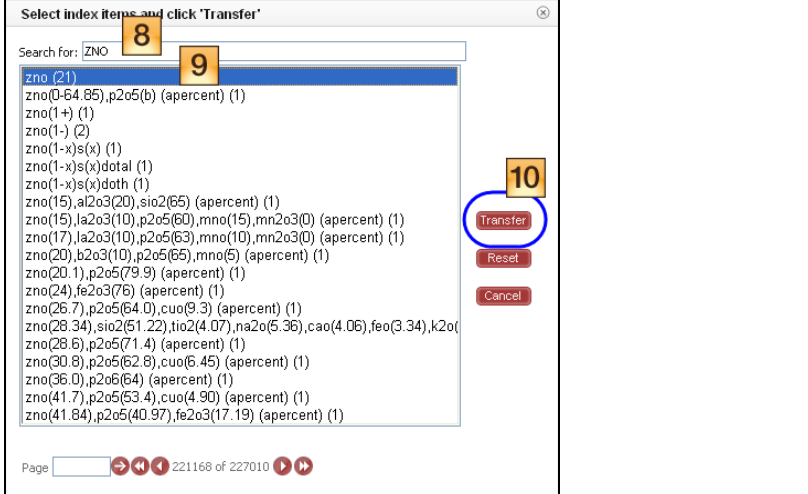
ここでは両方とも物質名で入力しています。

(無機化合物の場合) :

無機化合物の検索はGmelinと同じ検索式で検索できます。

検索式はAdvanced検索の「Linear Structure Formula」機能を用いて入力します。

検索例：ZnO と TiO₂ の混合物の物性値を検索する

<p>Step 1 – 3</p> <p>「Substances and Properties」タブを選択し、「Properties (Advanced)」 → 「Show Fields and Operators」の順にクリックする。</p>	
<p>Step 4 – 7</p> <p>「Identification」→「Substance Identification」→「Linear Structure Formula (IDE.LSF)」の順に選択し、「…」ボタンをクリックする。</p>	
<p>Step 8 – 10</p> <p>入力欄に「zno」と入力し、表示された候補リストの一番上の「ZNO(21)」を選択して「Transfer」ボタンをクリックする。</p>	

Step 11

表示された検索式を、手入力で「IDE.LSF = 'zno*tio2」
と修正する。

Properties (Form-based) Properties (Advanced)

IDE.LSF = 'zno'

Hide Fields and Operators Check Syntax

SEARCH FOR FIELD RESET

Step 10 まで操作するとこのように表示される

Properties (Form-based) Properties (Advanced)

IDE.LSF = 'zno*tio2'

Hide Fields and Operators Check Syntax

SEARCH FOR FIELD RESET

11

手入力でこのように修正する

Step 12

「Search」ボタンをクリックすると検索結果が表示される。「Show Details」をクリックすると
出典文献へのリンクが表示される。

3 substances out of 9 citations

Substances (Grid) Substances (Table) Citations

Limit to Selection Output Quick Print Sort by No of Ref

Structure	Chemical Name	N° of prepar
mixture (composition partially given): Titanium(IV) oxide zinc oxide	titanium oxide doped zinc oxide	1 prep out of 1 reactions.
		1 prep out of 1 reactions.

1

Synthesize Show Details

12

O₇Ti₂Zn

Substances (Grid) Substances (Table) Citations

Limit to Selection Output Quick Print Sort by No of References

Structure	Chemical Name	N° of preparations	Available Data	N° of ref.	Boil
mixture (composition partially given): Titanium(IV) oxide zinc oxide	titanium oxide doped zinc oxide	1 prep out of 1 reactions.	Physical Data (5) Spectra (3) Use/Application (9)	6	

1

Synthesize Hide Details

Structure/Compound Data

Reaxys Registry Number: 11381866

Composition: Titanium(IV) oxide zinc oxide

Type of Substance: mixture (composition partially given)

Physical Data

Crystal Phase (1)

Description	Comment	Reference
Crystal growth forms	from Gmelin	Chung, Jeng-Lin; Chen, Jyh-Chen; Tseng, Chung-Jen Journal of Physics and Chemistry of Solids, 2008, vol. 69, p. 535 - 539 Title/Abstract Full Text View citing articles Show Details

Electrical Data (2)

Description	Comment	Reference
Electronic band structure	from Gmelin	Turkina, L. I.; Sychev, M. M.; Sudakas, L. G. Journal of Applied Chemistry USSR (English Translation), 1981, vol. 54, p. 1098 - 1103 Zhurnal Prikladnoi Khimii (Sankt-Peterburg, Russian Federation), 1981, vol. 54, p. 1315 - 1321 Full Text Show Details
Electrical conduction mechanism	from Gmelin	Turkina, L. I.; Sychev, M. M.; Sudakas, L. G. Journal of Applied Chemistry USSR (English Translation), 1981, vol. 54, p. 1098 - 1103