

## DEPARTAMENTO DE QUÍMICA INORGÁNICA

Tutorial sobre [ChemSpider.com](http://www.chemspider.com)  
<http://www.chemspider.com>

José Antonio García López

ChemSpider.com es una base de datos que ofrece mucha información sobre una amplia variedad de compuestos químicos (114 millones de sustancias, según la propia página).

La página de inicio nos ofrece distintas maneras de realizar búsquedas, pero las más útiles son "Simple" y "Structure".

The screenshot shows the ChemSpider homepage. At the top, there is a navigation bar with links for Home, About us, Web APIs, Help, and Sign in. The ChemSpider logo and tagline "Search and share chemistry" are prominently displayed. A search bar is located in the top right corner. Below the navigation bar, a purple banner contains a message about COVID-19. A red box highlights the search options: Simple, Structure, Advanced, and History, with a red arrow pointing to the "Simple" option. Below this, the "Search ChemSpider" section features a search input field and a search button. A table below the search field provides information about the database and search methods. An advertisement for "UHPLC Troubleshooting Guide" is visible on the right side.

What is ChemSpider?	Search by chemical names	Search by chemical structure	Find important data
ChemSpider is a free chemical structure database providing fast text and structure search access to	<ul style="list-style-type: none"><li>Systematic names</li><li>Synonyms</li><li>Trade names</li><li>Database identifiers</li></ul>	<ul style="list-style-type: none"><li>Create structure-based queries</li><li>Draw structures in the web page</li><li>Use structure files</li></ul>	<ul style="list-style-type: none"><li>Literature references</li><li>Physical properties</li><li>Interactive spectra</li><li>Chemical suppliers</li></ul>

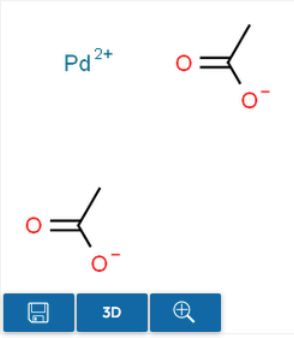
Con la opción "Simple", podemos introducir en el cuadro de búsqueda el nombre de la sustancia en inglés, su nombre común (por ejemplo "aspirin" en vez de "acetyl salicylic acid"), la fórmula (en caso de compuestos sencillos:  $H_2SO_4$  por ejemplo) o su número CAS, si lo conocemos.

The screenshot shows the ChemSpider search results page. The search bar contains the text "palladium acetate" and a search button. Below the search bar, the results are displayed as "palladium acetate". A "FILTER" button is visible on the left, and a "Search Hits Limit: 100" dropdown menu is on the right.

Por ejemplo, si buscamos "palladium acetate", nos llevará a una nueva ventana en la que aparece en primer lugar la fórmula y el peso molecular. Más abajo, se encuentra la pestaña "**More details**", donde hay información más detallada. La pestaña "**Names**" nos muestra otros posibles nombres alternativos de ese compuesto. Tal vez, las pestañas más interesantes son las de "**Properties**" y "**Spectra**".

Search term: **palladium acetate** (Found by approved synonym)

**THIS RECORD**



**Palladium(II) acetate**

Molecular Formula	C <sub>4</sub> H <sub>6</sub> O <sub>4</sub>
Pd	
Average mass	224.508
Da	
Monoisotopic mass	223.930099 Da
ChemSpider ID	146827

[- Charge](#)

▼ **More details:**

This record has not been tagged. + TAG

**Names** | Properties | Searches | Spectra | Vendors | Articles | More ▼

Names and Synonyms | Database ID(s)

Si pinchamos la pestaña "**Properties**" podemos ver, por ejemplo, su punto de fusión según distintas fuentes, que se indican en cada caso.

Names | **Properties** | Searches | Spectra | Vendors | Articles | More ▼

Experimental data
Predicted - ACD/Labs
Predicted - ChemAxon

### Experimental Physico-chemical Properties

^ **Experimental Melting Point:**

- 205 °C (Decomposes) **Alfa Aesar**

---

- 205 °C (Decomposes) **Alfa Aesar** [10516](#), [43086](#)

---

- 216-223 °C (Decomposes) **Oakwood**

---

- 216.3-223.7 °C (Decomposes) **LabNetwork (old)** [LN00193292](#)

---

- 205 °C (Decomposes) **SynQuest** [2122-1-46](#)

---

- 227-231 °C **Chemenu** [CM102860](#)

---

- 216.3-223.7 °C (Decomposes) **Sigma-Aldrich** [ALDRICH-205869](#)

---

- 216-223 °C (Decomposes) **Oakwood** [035785](#), [102429](#)

Si buscamos una sustancia orgánica, por ejemplo "4-methylpyridine", podemos ver información de distintas propiedades como puntos de fusión y ebullición, densidad, índice de refracción, frases de seguridad y precaución para manipular este reactivo, etc.

Names Properties Searches Spectra Vendors Articles More ▾

Experimental data Predicted - ACD/Labs Predicted - EPISuite Predicted - ChemAxon Predicted - Mcule

### Experimental Physico-chemical Properties

▾ Experimental Melting Point:

▾ Experimental Boiling Point:

▾ Experimental Flash Point:

▾ Experimental Refraction Index:

▾ Experimental Density:

### Miscellaneous

▾ Safety:

En la pestaña "**Spectra**", nos aparece la información espectroscópica disponible. En este caso, podemos ver su espectro IR. En otros casos, también se encuentran disponibles los espectros de RMN.

Names Properties Searches **Spectra** Vendors Articles More ▾

^ Infrared

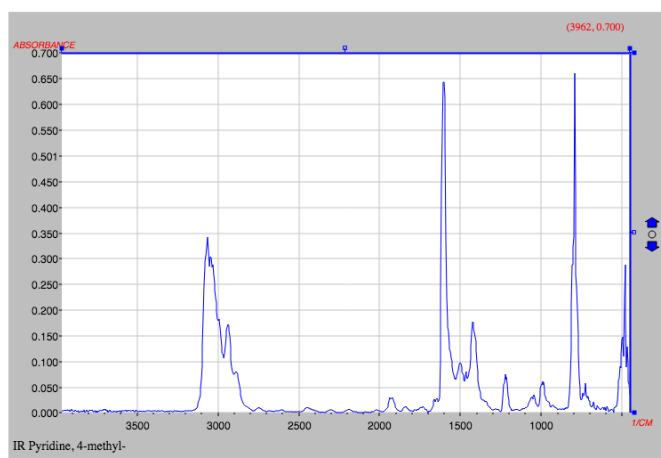
Associated Hyperlink: <http://www.nist.gov/srd/nist35.cfm>

Comments: Provided with permission June 21 2012. Sourced from the NIST Standard Reference Database 35 - NIST/EPA Gas Phase Infrared Library. Copyright by the U.S. Department of Commerce on behalf of the United States

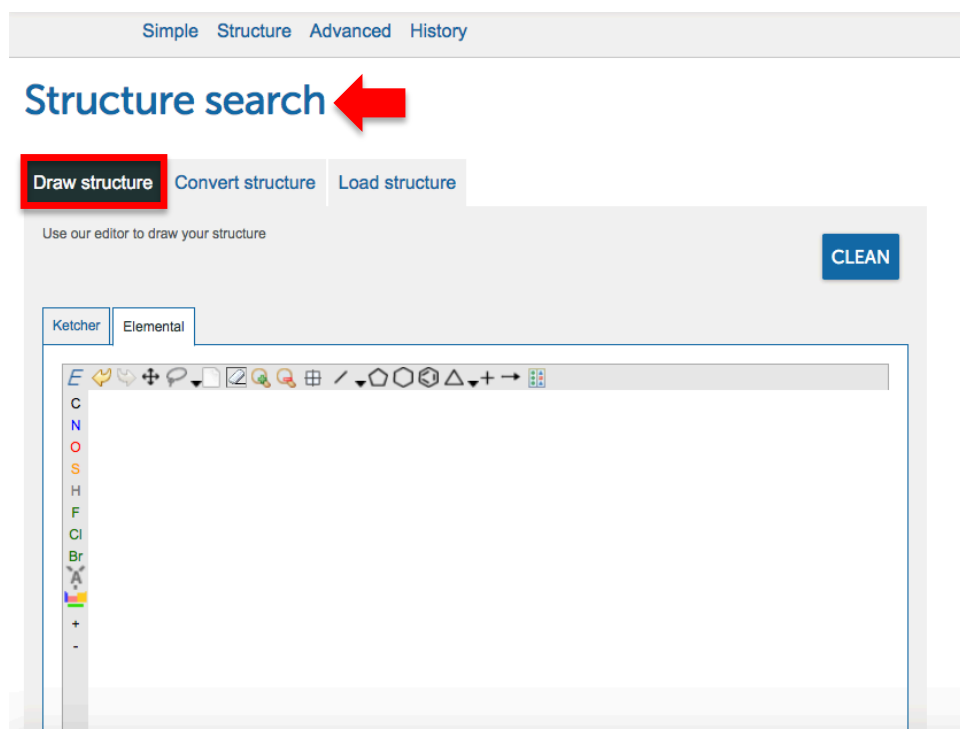
Submitted by: [antony.williams](#)

JSpecView

JSpecView (Java)



Para buscar sustancias de estructura molecular más compleja, de las que no estemos seguros de su nombre o conozcamos su número CAS, es preferible utilizar la búsqueda por estructura molecular en la pestaña "**Structure**" en la página de inicio.



Simple Structure Advanced History

## Structure search

Draw structure Convert structure Load structure

Use our editor to draw your structure **CLEAN**

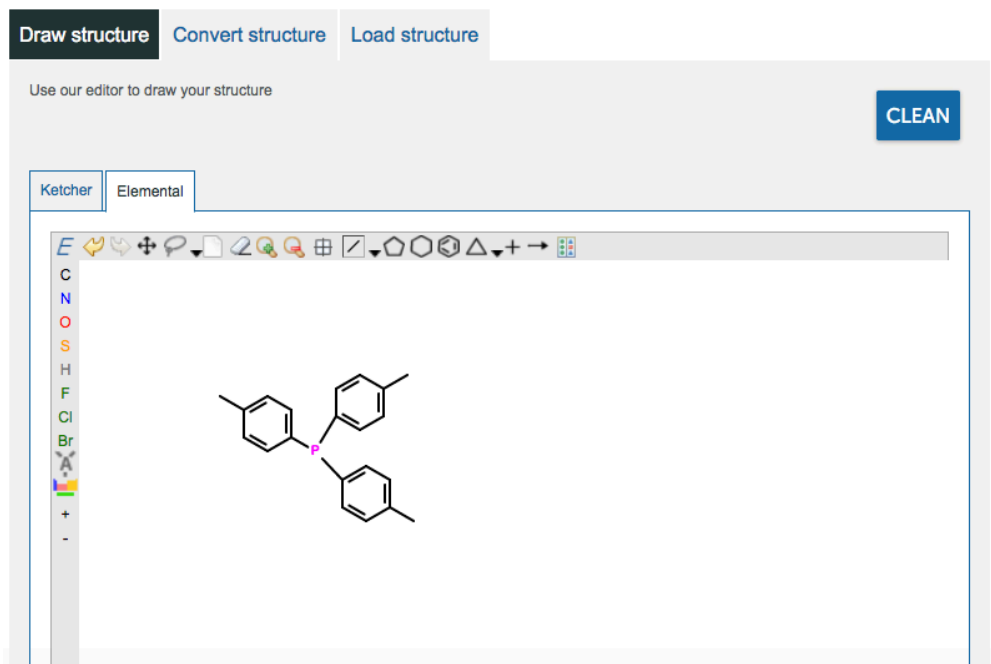
Ketcher Elemental

E

C  
N  
O  
S  
H  
F  
Cl  
Br  
A  
+  
-

Utilizando los iconos de enlaces, anillos, átomos, etc., podemos ir dibujando la estructura que nos interesa buscar. Por ejemplo, la tri-(*p*-tolil)fosfina:

## Structure search



Draw structure Convert structure Load structure

Use our editor to draw your structure **CLEAN**

Ketcher Elemental

E

C  
N  
O  
S  
H  
F  
Cl  
Br  
A  
+  
-

Cc1ccc(cc1)P(c2ccc(C)cc2)c3ccc(C)cc3

Una vez hemos dibujado la estructura que nos interesa, en la parte baja de la ventana seleccionamos "**Exact**" si queremos que nos aparezca únicamente esa

sustancia. Si seleccionamos "**Substructure**" nos aparecerá un listado sustancias con estructura parecida, por ejemplo, con algún sustituyente adicional.

Search options

Exact Substructure Similarity

Exact Match

All Tautomers

Same Skeleton (Including H)

Same Skeleton (Excluding H)

All Isomers

FILTER ▾ Search Hits Limit: 100 ▾ CLEAR FORM SEARCH

Al hacer clic en "**Search**", nos aparecerá de nuevo la misma clasificación de nombre, propiedades, espectros para esta sustancia concreta:

Found 1 result COMMENT ON THIS RECORD

Search term: **Structure Search - Exact**

**TpTp**

Molecular Formula	C <sub>21</sub> H <sub>21</sub> P
Average mass	304.365 Da
Monoisotopic mass	304.138092 Da
ChemSpider ID	13352

More details:

This record has not been tagged. + TAG

**Names** Properties Searches Spectra Vendors **Articles** More ▾

Experimental data Predicted - ACD/Labs Predicted - EPISuite Predicted - ChemAxon

Predicted - Mcule

Para realizar otra búsqueda, pinchamos en "**Clear form**" y podemos empezar a dibujar de nuevo.

Adicionalmente, es posible ver referencias de artículos científicos en los que se ha empleado la sustancia que hemos buscado, ya sea como reactivo, catalizador, disolvente, etc. Esta información aparece en la pestaña "**Articles**".