

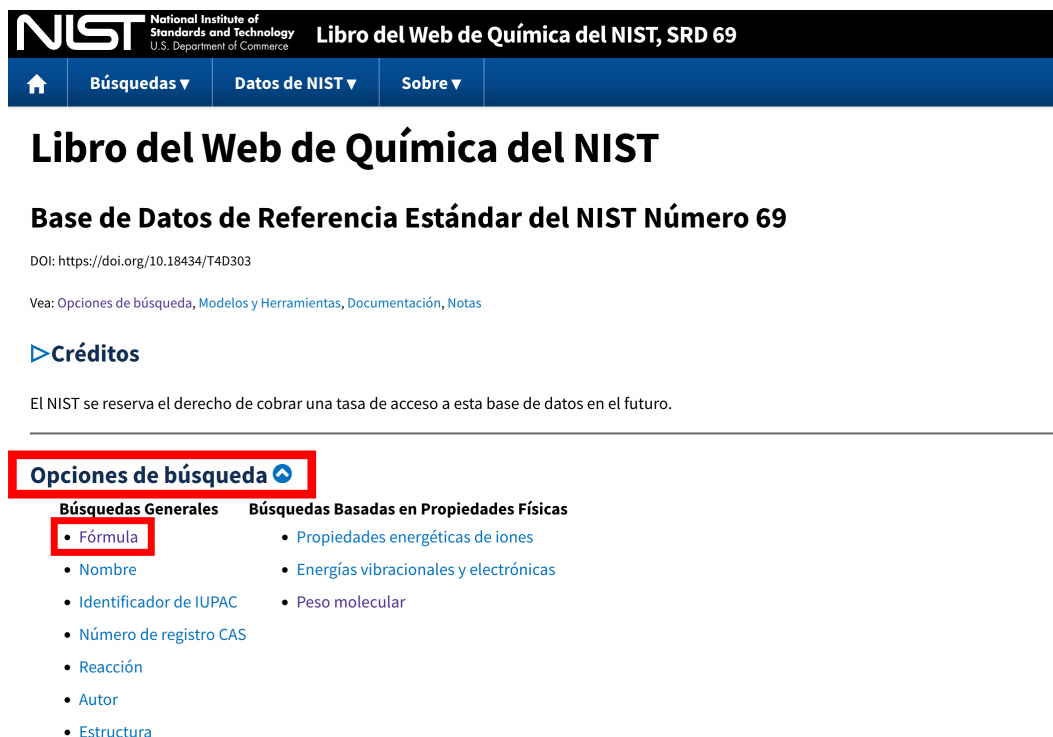
DEPARTAMENTO DE QUÍMICA INORGÁNICA

Tutorial sobre [NIST Chemistry webBook](#)
(Libro del Web de Química, del NIST, SRD 69)
<https://webbook.nist.gov/chemistry/>

Isabel M. Saura Llamas

El Libro del Web de Química del NIST proporciona un acceso fácil a las propiedades físicas y químicas de numerosos compuestos y a sus datos de caracterización estructural (IR, UV-Vis, masas y cromatografía de gases). Permite realizar dos tipos de búsquedas distintas: búsqueda directa de compuestos químicos y búsquedas indirectas basadas en datos relacionados.

En la página principal se nos ofrece la posibilidad de realizar la búsqueda de compuestos de forma general (por nombre, fórmula, número de registro de CAS, autor o estructura) o basada en alguna propiedad química (como el peso molecular). Es importante tener en cuenta que la búsqueda por nombre ha de hacerse en inglés. Si queremos conocer las propiedades de la bencilamina y queremos buscar por **Fórmula**, seleccionaremos esa opción:



The screenshot shows the NIST Chemistry webBook interface. At the top, there is a navigation bar with the NIST logo and the text 'National Institute of Standards and Technology U.S. Department of Commerce'. Below the logo, it says 'Libro del Web de Química del NIST, SRD 69'. The navigation bar includes a home icon, 'Búsquedas', 'Datos de NIST', and 'Sobre'. The main heading is 'Libro del Web de Química del NIST'. Below this, it says 'Base de Datos de Referencia Estándar del NIST Número 69' and provides a DOI: <https://doi.org/10.18434/T4D303>. There is a link to 'Opciones de búsqueda, Modelos y Herramientas, Documentación, Notas'. A section titled 'Créditos' states: 'El NIST se reserva el derecho de cobrar una tasa de acceso a esta base de datos en el futuro.' Below this, there is a section titled 'Opciones de búsqueda' with a refresh icon. Under 'Opciones de búsqueda', there are two columns: 'Búsquedas Generales' and 'Búsquedas Basadas en Propiedades Físicas'. The 'Búsquedas Generales' column has a red box around the 'Fórmula' option, which is also highlighted with a red box. The other options in this column are 'Nombre', 'Identificador de IUPAC', 'Número de registro CAS', 'Reacción', 'Autor', and 'Estructura'. The 'Búsquedas Basadas en Propiedades Físicas' column has three options: 'Propiedades energéticas de iones', 'Energías vibracionales y electrónicas', and 'Peso molecular'.

En la siguiente pantalla, introduciremos la fórmula C_7H_9N en la casilla indicada y presionamos **Búsqueda**.

Búsqueda de datos de especies por Fórmula Química



Por favor, siga los pasos indicados abajo para realizar su búsqueda ([Ayuda](#)):

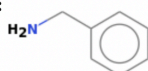
- Introduzca la fórmula química deseada (por ejemplo, C₄H⁺Cl)
- Seleccione las opciones deseadas en la búsqueda:
 - Exactly match the specified isotopes. ([Ayuda](#))
 - Permitir elementos no especificados en la fórmula. ([Ayuda](#))
 - Permitir más átomos de elementos en la fórmula de los que especificado. ([Ayuda](#))
 - Excluir iones de la búsqueda. ([Ayuda](#))
- Seleccione las unidades deseadas para los datos termodinámicos:
 - SI en calorías
- Seleccione los tipos de datos deseados:

Datos Termodinámicos	Otros datos
<input type="checkbox"/> Fase gaseosa	<input type="checkbox"/> Espectro de IR
<input type="checkbox"/> Fase condensada	<input type="checkbox"/> Espectro de THz IR
<input type="checkbox"/> Cambio de fase	<input type="checkbox"/> Espectro de masa
<input type="checkbox"/> Reacción	<input type="checkbox"/> Espectro UV/Vis
<input type="checkbox"/> Energética de iones	<input type="checkbox"/> Cromatografía de gas
<input type="checkbox"/> Agregados iónicos	<input type="checkbox"/> Niveles de energía electrónica y vibracional
	<input type="checkbox"/> Constantes de moléculas diatómicas
	<input type="checkbox"/> Ley de Henry
- Pulse aquí para realizar la búsqueda

La siguiente pantalla ofrece un listado de compuestos que responden a esa fórmula química. Si seleccionamos el correcto, llegamos a una nueva página con toda la información disponible sobre este compuesto.

Benzylamine

- Fórmula:** C₇H₉N
- Peso molecular:** 107.1531
- IUPAC InChI Estándar:** InChI=1S/C7H9N/c8-6-7-4-2-1-3-5-7/h1-5H,6,8H2  **InChI** v 1.06
- IUPAC InChIKey Estándar:** WGQKYBSKWIADBV-UHFFFAOYSA-N 
- Número de registro CAS:** 100-46-9
- Estructura química:**



Esta estructura está también disponible como [2d Mol file](#) o como [computed 3d SD file](#).

- Otros nombres:** Benzenemethanamine; α-Aminotoluene; ω-Aminotoluene; (Phenylmethyl)amine; Monobenzylamine;
- Información en esta página:**
 - [Notes](#)
- Otros datos disponibles:**
 - [Datos de fase gaseosa](#)
 - [Datos de fase condensada](#)
 - [Datos de cambio de fase](#)
 - [Datos de energética de iones on fase gaseosa](#)
 - [Espectro de IR](#)
 - [Espectro de masa \(ionización del electrón\)](#)
 - [Espectro de UV/Visible](#)
 - [Cromatografía de gas](#)
- Datos en otros sitios públicos del NIST:**
 - [Gas Phase Kinetics Database](#)
- Opciones:**
 - [Switch to calorie-based units](#)

Es especialmente interesante la posibilidad de descargarse ficheros mol o sdf, que luego pueden importarse en otros programas de simulación de espectros.¹

Además del espectro IR, tenemos mucha otra información valiosa sobre la anilina:

• **Otros datos disponibles:**

- Datos de fase gaseosa
- Datos de fase condensada
- Datos de cambio de fase
- Datos termodinámicos de reacción
- Datos de energética de iones on fase gaseosa
- Datos de agregados iónicos
- **Espectro de IR**
- Espectro de masa (ionización del electrón)
- Espectro de UV/Visible
- Cromatografía de gas

Si hemos seleccionado **Espectro de IR**, llegamos a una nueva pantalla que nos ofrece varias opciones.

Espectro de IR

Go To: [Top](#), [References](#), [Notes](#)

Data compiled by: [Coblentz Society, Inc.](#)

- LIQUID (NEAT); PERKIN-ELMER 521 (GRATING); DIGITIZED BY NIST FROM HARD COPY (FROM TWO SEGMENTS); 2 cm⁻¹ resolution

Data compiled by: NIST Mass Spectrometry Data Center, William E. Wallace, director

- gas; HP-GC/MS/IRD

Podemos consultar el espectro IR en fase líquida (sustancia neta o en disolución) o en fase gaseosa. Seleccionando el IR de la sustancia líquida neta, nos aparecerá en pantalla el espectro completo.

Infrared Spectrum

Go To: [Top](#), [References](#), [Notes](#)

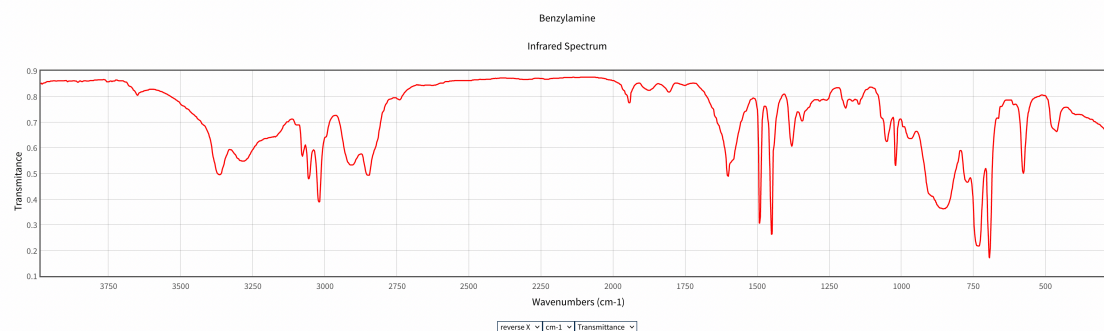
Data compilation copyright by the U.S. Secretary of Commerce on behalf of the U.S.A. All rights reserved.

Data compiled by: [Coblentz Society, Inc.](#)

Condensed Phase Spectrum

Plot

[Help / Software credits](#)



¹ Los ficheros mol pueden abrirse con Mercury (estructura experimental) y los sdf con ChemDraw (estructura simulada).

Más abajo, en la misma pantalla, aparecen varias opciones sobre lo que podemos hacer con el espectro.

Additional Data

[View scan of original \(hardcopy\) spectrum.](#)

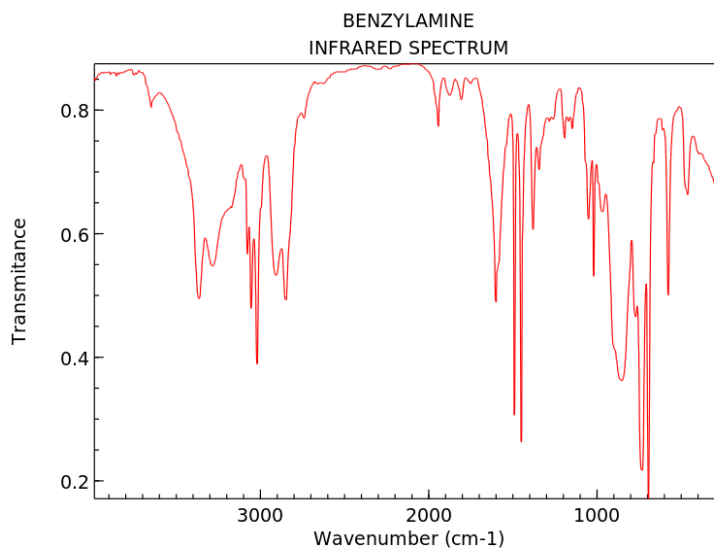
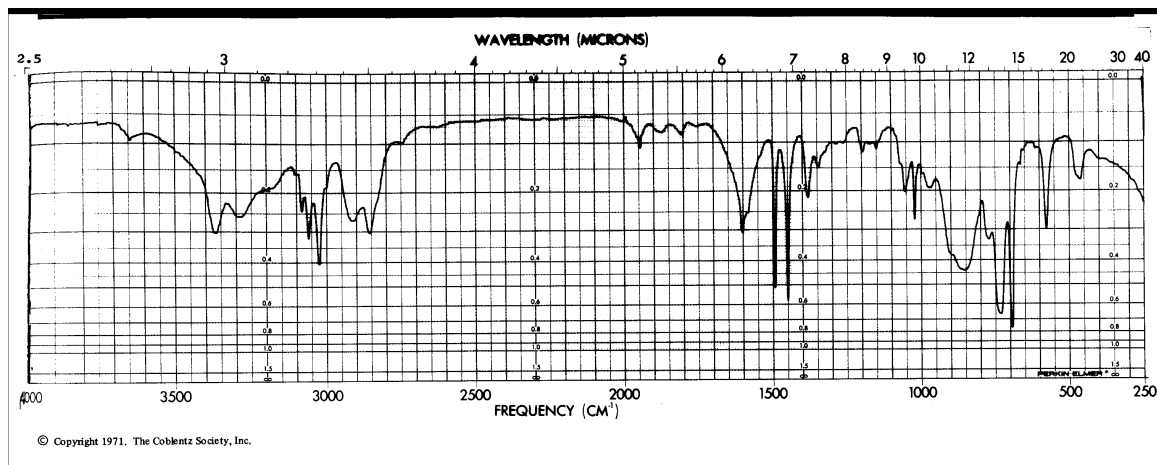
[View image of digitized spectrum \(can be printed in landscape orientation\).](#)

[View spectrum image in SVG format.](#)

[Download spectrum](#) in JCAMP-DX format.

Owner	COBLENTZ SOCIETY Collection (C) 2018 copyright by the U.S. Secretary of Commerce on behalf of the United States of America. All rights reserved.
Origin	SOUTHERN RESEARCH INSTITUTE
Source reference	COBLENTZ NO. 7375
Date	1965/02/22
Name(s)	phenylmethanamine
State	LIQUID (NEAT)
Instrument	PERKIN-ELMER 521 (GRATING)
Instrument parameters	FILTERS AT 3130, 2475, 2000, 620. GRATING CHANGES: 2000, 630 cm^{-1}
Path length	CAPILLARY
Resolution	2
Sampling procedure	TRANSMISSION
Data processing	DIGITIZED BY NIST FROM HARD COPY (FROM TWO SEGMENTS)

Por ejemplo, podemos descargar el espectro original en papel o en formato png.



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