

DEPARTAMENTO DE QUÍMICA INORGÁNICA

Tutorial sobre [Spectral Database for Organic Compounds SDBS](https://sdfs.db.aist.go.jp/sdfs/cgi-bin/cre_index.cgi)
(Base de Datos de Química)

https://sdfs.db.aist.go.jp/sdfs/cgi-bin/cre_index.cgi

M^a José Piernas Muñoz

La *Spectral Database for Organic Compounds SDBS* es una base de datos de carácter abierto que recopila espectros infrarrojos, Raman, de masas, de RMN (¹H y ¹³C-RMN), así como EPR. Entre sus limitaciones destaca que, en la mayoría de las ocasiones, sólo algunos de los espectros mencionados están disponibles y que se limita a compuestos orgánicos.

Se accede a través de la siguiente dirección https://sdfs.db.aist.go.jp/sdfs/cgi-bin/cre_index.cgi.

En la parte inferior, se ha de clicar en “[I agree the disclaimer and use SDBS.](#)” para aceptar el descargo de responsabilidad y así poder usar SDBS.

Nos redirige, entonces, a una página que permite buscar compuestos a partir del nombre (*compound name*), fórmula molecular (*molecular formula*), peso molecular (*molecular weight*), n° CAS (*CAS Registry No.*) o el n° de SDBS (*SDBS No.*). Además, en el desplegable de al lado, se puede elegir entre un “*match partial*” o “*match full*”, es decir, que coincida *parcialmente* o *completamente* con la búsqueda que se está efectuando.

Alternativamente, se pueden realizar búsquedas dando un rango de n° de átomos (*Atoms*) de C, H, N, O, F, Cl, Br, I, S y/o Si.

Para un determinado compuesto, brinda una amplia batería de posibles espectros a buscar, entre los que se encuentra: espectrometría de masas (MS), infrarrojo (IR), resonancia magnética nuclear (^1H - y ^{13}C -RMN), Raman y resonancia de espín electrónico (ESR). Incluso permite limitar la búsqueda a un(os) pico(s) de IR, desplazamiento(s) de RMN y pico(s) de MS concreto(s).

Además, en el menú de herramientas que aparece en la parte inferior, se pueden variar los criterios de búsqueda, eligiendo en el desplegable si se quieren mostrar 20, 50 o 100 resultados (*Hit*: 20 hit, 50 hit, 100 hit). También permite clasificar las entradas que arroja una búsqueda, ya sea ordenándolas en base a su peso molecular (*Molecular Weight*), al n° de carbonos (*Carbon number*) o al n° SDBS (*SDBS No.*), y de forma ascendente o descendiente (*Ascending Order/Descending Order*).

Por ejemplo, vamos a hacer una búsqueda parcial de “Glucosa”. Se escribe “glucose” (ha de ser en inglés) en el espacio habilitado para ello, debajo de “Compound Name”.

Spectral Database for Organic Compounds SDBS [Japanese](#) [Introduction](#) [Disclaimer](#) [HELP](#) [Contact](#) [What's New](#) [RIO-DB](#) [FAQ](#) [LINK](#) [AIST](#)

SDBS Compounds and Spectral Search

Compound Name:

Molecular Formula:

C, H, then the other elements are alphabetical order, "%*" for the wild card

Molecular Weight: to

Numbers between left and right columns Up to the first place of a decimal point

CAS Registry No.:

"%*" for the wild card.

SDBS No.:

"%*" for the wild card.

Atoms:

C(Carbon) to

H(Hydrogen) to

N(Nitrogen) to

O(Oxygen) to

F(Fluorine) to

Cl(Chlorine) to

Br(Bromine) to

I(Iodine) to

S(Sulfur) to

P(Phosphorus) to

Si(Silicon) to

Numbers between left and right columns.

Spectrum:

Check the spectra of your interest.

MS IR

¹³C NMR Raman

¹H NMR ESR

IR Peaks(cm⁻¹): Allowance ± 10

"," or space is the separator for multiple peaks.
Use "-", to set a range: eg. 550-750,1650-3000-

Transmittance < %

¹³C NMR Shift(ppm): Allowance ± 2.0

"," is the separator for multiple shifts, eg. 129.3,18.4,...

No shift regions:

Range defined by two numbers separated by a space, eg. 110 78,...

¹H NMR Shift(ppm): Allowance ± 0.2

No shift regions:

MS Peaks and intensities:

Mass and its intensity are a set of data separated by a space, eg. 110 22,...



Hit: Sort by: Result Display type: with Structures

A continuación, se clicla en “**Search**”, obteniéndose los siguientes resultados:

Spectral Database for Organic Compounds SDBS [Japanese](#) [Introduction](#) [Disclaimer](#) [HELP](#) [Contact](#) [What's New](#) [RIO-DB](#) [FAQ](#) [LINK](#) [AIST](#)

SDBS Search Results: 1 - 20 out of 40 hits Sort by:

SDBS No	Molecular Formula	Molecular Weight	MS	CNMR	HNMR	IR	Raman	ESR	Compound Name
19477	C6H6O3	126.1	Y	Y	Y	Y	N	N	levoglucosone
19964	C6H10O5	162.1	Y	Y	Y	Y	N	N	1,6-anhydro-beta-D-glucose
2014	C6H12O5	164.2	Y	N	Y	Y	N	N	2-deoxy-D-glucose
2535	C6H13NO5 HCl	179.2	Y	Y	N	Y	N	N	D-glucosamine hydrochloride
44662	C6H13NO5	179.2	N	Y	N	N	N	N	D-glucosamine
11521	C6H12O6	180.2	Y	N	N	Y	N	N	D-glucose
13453	C7H14O6	184.2	N	Y	Y	Y	N	N	3-O-methyl-alpha-D-glucopyranose
15754	C6H12O5S	196.2	Y	N	N	Y	N	N	5-thio-D-glucose
13527	C8H17NO7	251.2	Y	N	N	Y	N	N	(+)-muramic acid
15274	C12H23O6	280.3	Y	N	Y	Y	N	N	1,2,5,6-di-O-isopropylidene-D-glucopyranose
10711	C8H12F3NO6	275.2	Y	N	N	Y	N	N	n-trifluoroacetyl-D-glucosamine
967	C10H22O5S2	286.4	Y	N	N	Y	N	N	glucose diethyl dithioacetal
19644	C10H22O5S2	286.4	Y	Y	Y	Y	N	N	D-glucose diethyl dithioacetal
12031	C11H19NO8	293.3	Y	N	N	Y	N	N	(+)-N-acetylmuramic acid
15200	C12H22O10	326.3	N	N	N	Y	N	N	rutinose
4502	C6H11K2O9P 2H2O	336.3	N	Y	Y	Y	N	N	alpha-D-glucose-1-phosphate dipotassium salt
10390	C6H11K2O9P	336.3	N	Y	N	Y	N	N	D-glucose 6-phosphate dipotassium salt
1186	C12H22O11	342.3	N	Y	Y	Y	N	N	D-gentibiose
2588	C12H22O11 (H2O)	342.3	N	Y	N	Y	N	N	D-(+)-maltose
6409	C12H22O11	342.3	N	Y	Y	Y	N	N	D-(+)-cellobiose

1 2

[Return to Search](#)
(c) National Institute of Advanced Industrial Science and Technology (AIST)

La entrada con n° de SDBS 11521, correspondiente a la glucosa, refleja que únicamente están disponibles (Y) los espectros de masas e infrarrojo de este compuesto. Por el contrario, la letra “N” presente en las columnas de los espectros restantes (CNMR, HNMR, Raman y ESR) indica que esta base de datos no cuenta con esta información.

Para visualizar los espectros de masas o infrarrojo de la glucosa, sencillamente se pulsa sobre “Y” del espectro que se desea ver. En este ejemplo particular, vamos a seleccionar el de masas y aparece lo siguiente:

SDBS Information

SDBS No.: 11521

Compound Name:
D-glucoseMolecular Formula: $C_6H_{12}O_6$

Molecular Weight: 180.2

CAS Registry No.:
50-99-7

Spectral Code:

[Mass:](#)[IR:](#) [nujol.mull](#)[Chemical Information:](#)[Return to Search:](#)[Return to Result:](#)

URL for this Compound:

<https://sdb.sdb.aist.go.jp/sdb/cgibin/landingpage/sdbshow11521>

External Information:

[external link displays in a separate page](#)

- [Japan Chemical Information Link Center](#) (in Japanese)

[JST NiiKaji Web](#) (in Japanese)

SDBS-Mass

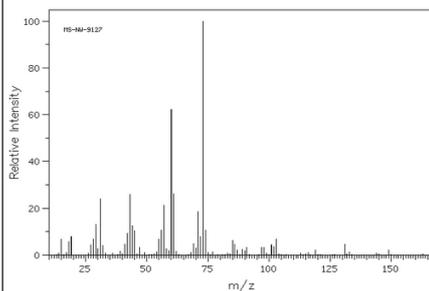
HS-NW-9127

SDBS NO. 11521

D-glucose*

C6H12O6

(mass of molecular ion: 180)



Source Temperature: 200 °C

Sample Temperature: 140 °C

Direct: 75 eV

[peak data](#)

MS-NW-9127 SDBS NO. 11521

DOI:

Sample InChI:

InChI=1S/C6H12O6/c7-1-3(9)5(11)6(12)4(10)2-8/h1,3-6,8-12H,2H2/3-4+,5+,6+/m0/s1

Sample InChIKey:

GZCGUPFRVQAUEE.SLPGGIOYSA-N

Publisher:

National Institute of Advanced Industrial Science and Technology (AIST)

Rights:

AIST all rights reserved

Publication date:

1999-03-31

Update History:

Se puede ver el aspecto del espectro (intensidad relativa vs. m/z) con su distribución isotópica correspondiente, así como la información del compuesto y la medida: n° SDBS (SDBS NO. 11521), fórmula molecular ($C_6H_{12}O_6$), la masa del ion molecular (Mass of molecular ion: 180 g/mol), la temperatura de la fuente (Source Temperature: 200 °C) y la de la muestra (Sample Temperature: 140 °C), así como el tipo de inserción (direct, “directa” en este caso) y la energía de ionización (75 eV). Si perteneciese a datos publicados en una revista, adicionalmente aparecería un DOI asociado. En este caso, no lo tiene.

Finalmente, los datos se pueden observar también en forma de tabla, si se clica en “Peak Data” y, aunque no se pueden exportar, sí que se pueden copiar.