

RECOMENDACIONES en la RED

Aquí encontrarás los enlaces a dos páginas web relacionadas con la química. Por un lado, te presentamos una base de datos de redes cristalinas y, por el otro, una completa base de datos espectroscópicas.

Imprescindibles si partes nuestro afán por aprender y ampliar tus conocimientos.

Recopiladas por Arkaitz Fidalgo-Marijuan (UPV/EHU)
(Todas las páginas eran accesibles en enero de 2016).



Base de datos de redes cristalinas RCSR

El portal web *Reticular Chemistry Structure Resource* (RCSR) es útil para el diseño de nuevas estructuras y materiales cristalinos, así como para el análisis de los ya existentes. La parte más importante es la base de datos de estructuras 3D, que contiene más de dos mil quinientas redes y permite búsquedas de todo tipo para obtener información cristalográfica, secuencias de coordinación e información de los vértices de cada tipo de red. Además, también hay una base de datos de redes 2D y poliedros de diferente tamaño. En caso de que

un investigador obtenga nuevas topologías durante sus síntesis también puede añadirlas a esta base de datos para ampliarla. La web está mantenida

por universidades de Estados Unidos, Australia y Suecia.

<http://rcsr.anu.edu.au/>

Search 3D Nets

Search Clear

Symbol ?
is

Names ?
is

Keywords ?

bipartite chiral
 clathrate good
 polar quasiregular net
 quasisimple tiling regular net
 self dual net semiregular net
 simple tiling uniform net
 uniform tiling zeolite net

Modifiers

include augmented (-a)
 exclude augmented (-a)
 exclude binary (-b...) and catenated (-c...)

RCSR
Reticular Chemistry Structure Resource

Found 2501 nets matching your search, showing 1 through 12.

pic	symbol	embed type	space group	vertices	edges	genus
	aab	1b	Pmmm	19	32	85
	abb	1b	Pmmm	19	32	85
	abf	1b	I-4m2	3	3	5
	abr	1b	P4(2)mm	3	3	16
	acs	1b	P6(3)mmc	1	1	5

Spectroscopic Tools

1H-Wizard: 7.2 go
chemical shift (ppm)

IR-Wizard: 1500 go
Wave number (cm⁻¹)

MS-Wizard: 43 go
m/e without any sign

Enhanced IR-Wizard (more than 2000 entries): 3150 go Wave number (cm⁻¹)

IR- Wizard Results:

IR- Wizard Results

You have searched for 1500cm⁻¹Hint: A benzene ring in this pictures means often aromatic systems in general!!

WAVE NUMBERS	INTENSITY	TYPE
1580 - 1490	w	
1600 and 1500	s	-NH ₃ ⁺
1660 - 1480	v	conjugated, cyclic
1600 and 1500	s	-NH ₃ ⁺
1660 - 1480	v	conjugated, cyclic
about 1600 , 1580 and 1500	all m	aromatic systems
1600 - 1500	s	C-N=O monomer
1550- 1460 (Amid II) and 1300 - 1100 (Amid I)	all s	-CS-NH-

Intensity:
s strong
m medium

Spectroscopic Tools

La página web *science-and-fun* tiene una herramienta llamada *Spectroscopic Tools* con tres asistentes de búsqueda de datos espectroscópicos altamente recomendada. Hay un asistente para espectros de resonancia magnética nuclear (RMN) de protón, otro para espectros de infrarrojo (IR) y uno más para búsqueda de datos de espectroscopia de masas (MS). Para cada uno de los asistentes de búsqueda solo es necesario introducir datos muy básicos como el desplazamiento químico (ppm), en el caso de ¹H-RMN, la longitud de onda (en cm⁻¹), para espectros IR, o la masa del fragmento a buscar, si se trata de MS. De esta manera, el asistente nos buscará, en diferentes bases de datos, moléculas, grupos funcionales o fragmentos que cumplan las condiciones de búsqueda que hemos determinado. La página web está mantenida por Steffen Thomas, un apasionado de la química.

<http://www.science-and-fun.de/tools/>