



ESCRITURA DE FÓRMULAS QUÍMICAS

CHEMICAL FORMULE

Podemos crear una molécula química a partir de una cadena de caracteres:

```
In[*]:= ChemicalFormula["(C6H5)2IBr"]  
|fórmula química
```

```
Out[*]:= (C6H5)2IBr
```

Su masa molecular:

```
In[*]:= %["MolecularMass"]
```

```
Out[*]:= 361.02 u
```

Otra molécula química a partir de una cadena de caracteres:

```
In[*]:= ChemicalFormula["(C6H11)2PCH2CH2P(C6H11)2"]  
|fórmula química
```

```
Out[*]:= (C6H11)2PCH2CH2P(C6H11)2
```

Su masa molecular:

```
In[*]:= %["MolecularMass"]
```

```
Out[*]=
```

```
422.62 u
```

Podemos incluir carga en la cadena:

In[*]:= `ChemicalFormula["H(P04)^2-"]`
[fórmula química]

Out[*]= $\text{H}(\text{PO}_4)^{2-}$

Se puede escribir la fórmula de un compuesto iónico, haciendo el recuento de elementos que lo componen y aplicando la carga neta:

```
In[*]:= ChemicalFormula [ <| phosphorus ELEMENT ... ✓ → 1,  
[fórmula química  
oxygen ELEMENT ... ✓ → 4|>, <|"NetCharge" → -3|> ]
```

```
Out[*]= PO43-
```

Podemos convertir un compuesto a una fórmula de Hill:

```
In[*]:= ChemicalFormula[  
  [fórmula química  
    {"F" → 1, "C" → 6, "H" → 3, {"C" → 1, "F" → 3},  
     [constante [constante  
      "C" → 1, "H" → 2, "O" → 1, "H" → 1}] ["HillFormula"]  
     [constante [notación O
```

```
Out[*]= C8H6F4O
```

Podemos encontrar los isómeros del heptano en Wolfram KnowledgeBase:

```

In[*]:= FindIsomers[ChemicalFormula[{"C" → 1, "H" → 3,
  encuentra isóm... [fórmula química]           [constante]
    {"C" → 1, "H" → 2} → 5, "C" → 1, "H" → 3}], "Entity"]
           [constante]           [constante]           [entidad]

Out[*]= { 2,2,3-trimethylbutane , 2,2-dimethylpentane , 2,3-dimethylpentane ,
  2,4-dimethylpentane , 2-methylhexane , 3,3-dimethylpentane ,
  3-ethylpentane , 3-methylhexane , N-heptane , isoheptane }

```

Podemos encontrar entidades químicas con una fórmula dada:

```

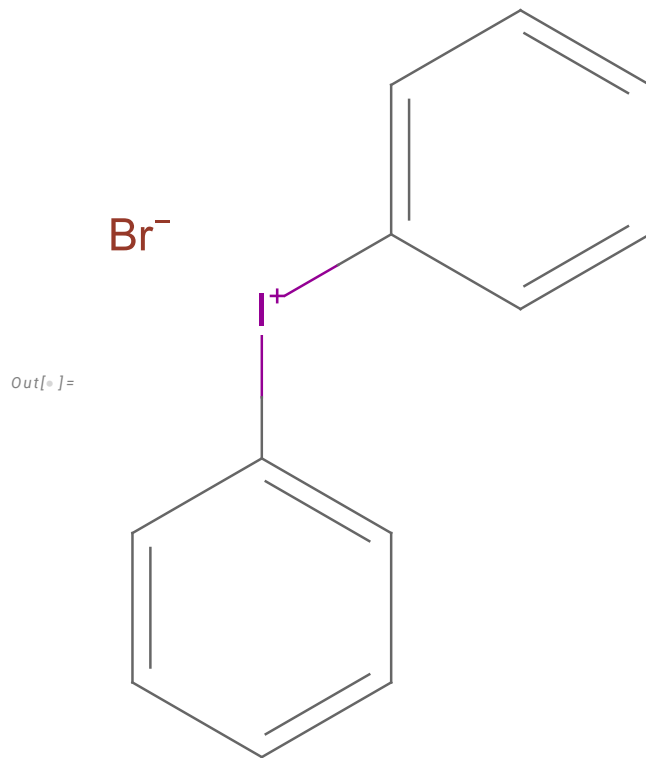
In[*]:= FindIsomers[ChemicalFormula["(C6H5)2IBr"], "Entity"]
  encuentra isóm... [fórmula química]           [entidad]

Out[*]= { diphenyliodonium bromide }

```

Si la representamos:

```
In[*]:= MoleculePlot@First@%  
[representación d... [primero
```



Podemos buscar isómeros del compuesto es una base de datos externa:

```
In[ ]:= FindIsomers[ChemicalFormula["(C6H5)2IBr"],  
[encuentra isóm...][fórmula química  
"PubChemCompoundID"]
```

```
Out[ ]:= { PubChem compound 5 161 539 ,  
PubChem compound 129 771 903 ,  
PubChem compound 46 941 351 ,  
PubChem compound 67 527 872 ,  
PubChem compound 68 835 755 ,  
PubChem compound 89 024 522 ,  
PubChem compound 124 132 314 ,  
PubChem compound 124 132 315 ,  
PubChem compound 126 548 410 ,  
PubChem compound 134 504 706 ,  
PubChem compound 135 292 257 ,  
PubChem compound 138 698 686 ,  
PubChem compound 165 389 489 ,  
PubChem compound 139 271 944 ,  
PubChem compound 146 019 054 ,  
PubChem compound 166 608 623 }
```