


Formas de escribir moléculas y sus identificadores.

Molecule

Crea una molécula a partir de una lista de átomos constituyentes y sus enlaces. Obtenemos la fórmula molecular, el número de átomos y enlaces, así como su notación SMILES e InChIkey:


```
in[*]:= Molecule[{"O", "H", "H"},  
             [molécula      [notación O  
             {Bond[{1, 2}, "Single"], Bond[{1, 3}, "Single"]}]  
             [enlace      [enlace
```

Out[*]=

```
Molecule [  Formula: H2O  
           Atoms: 3 Bonds: 2  
           SMILES: O([H])[H]  
           InChIKey: XLYOFNOQVPJJNP -UHFFFAO'
```

```
in[*]:= Molecule[{"C", "C", "H", "H", "H", "H", "H", "H"}, {  
             Bond[{1, 3}, "Single"], Bond[{1, 4}, "Single"], Boi  
             Bond[{2, 6}, "Single"], Bond[{2, 7}, "Single"], Boi
```

Out[*]=

```
Molecule [  Formula: C2H6  
           Atoms: 8 Bonds: 7  
           SMILES: C(C([H])([H])[H])([H])([H])[H]  
           InChIKey: OTMSDBZUPAUEDD -UHFFFAOYSA -N ]
```

```
In[*]:= Molecule[{Entity["Element", "Oxygen"],  
  [molécula [entidad [pertenece a  
    Entity["Isotope", "Hydrogen2"],  
    [entidad  
    Entity["Isotope", "Hydrogen2"]]},  
  [entidad  
  {Bond[{1, 2}, "Single"], Bond[{1, 3}, "Single"]}]  
  [enlace [enlace
```

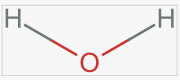
Out[*]=



**Crea una molécula a partir de una entidad química estandarizada.
Obtenemos la fórmula molecular, el número de átomos y enlaces, así
como su notación SMILES e InChIkey:**

```
In[*]:= Molecule[Entity["Chemical", "Water"]]
```

```
Out[*]=
```

```
Molecule [  Formula: H2O  
Atoms: 3 Bonds: 2  
SMILES: O([H])[H]  
InChIKey: XLYOFNOQVPJJNP -UHFFFAO'
```


```
In[*]:= Molecule[Entity["Chemical", "Ethane"]]
```

```
Out[*]=
```

```
Molecule [  Formula: C2H6  
Atoms: 8 Bonds: 7  
SMILES: C(C([H])([H])[H])([H])([H])[H]  
InChIKey: OTMSDBZUPAUEDD -UHFFFAO'
```

```
In[*]:= Molecule[Entity["Chemical", "Caffeine"]]
```

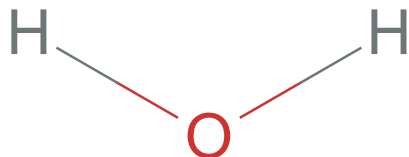
```
Out[*]=
```

```
Molecule [  Formula: C8H10N4O2  
Atoms: 24 Bonds: 25  
SMILES: O=c1n(C([H])([H])[H])c(=O)n(C  
([H])([H])[H])c2nc([H])n(C([H])  
([H])[H])c21  
InChIKey: RYYVLZVUVIJVGH -UHFFFAOYSA -N ]
```

La representación gráfica de la molécula es:

```
In[*]:= MoleculePlot[Entity["Chemical", "Water"]]  
[representación d· [entidad]
```

Out[*]=



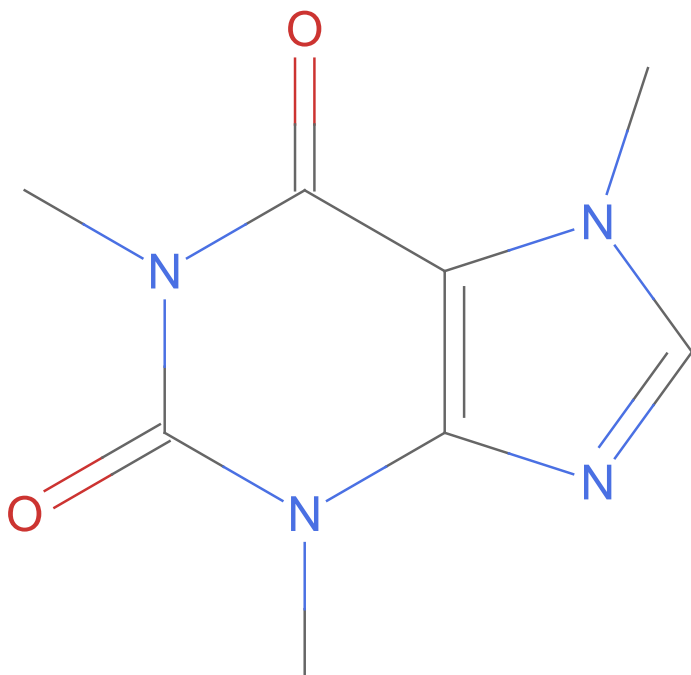
```
In[*]:= MoleculePlot[Entity["Chemical", "Ethane"]]  
[representación d· [entidad]
```

Out[*]=



```
In[*]:= MoleculePlot[Entity["Chemical", "Caffeine"]]  
[representación d· [entidad]
```

Out[*]=

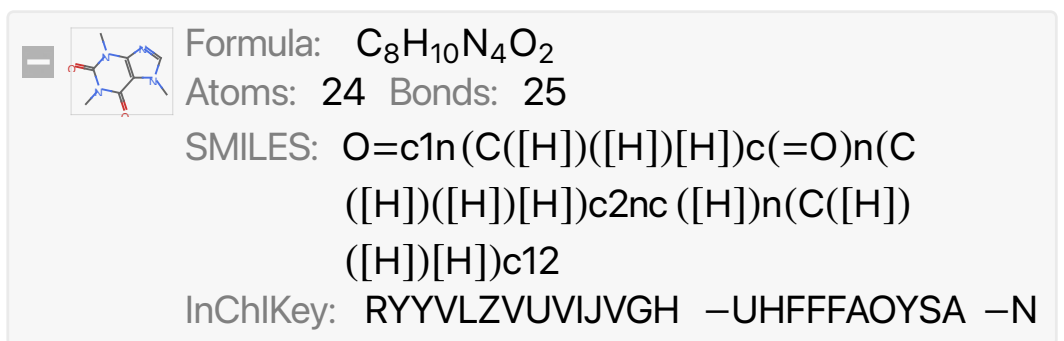


Podemos crear la molécula que corresponde a una notación SMILES:

```
In[*]:= Molecule[
  |molécula
  "O=c1n(C([H])([H])[H])c(=O)n(C([H])([H])[H])c2nc(
  |notación O |constante |notaci... |constante
  [H])n(C([H])([H])[H])c21"
  |constante
```

Out[*]=

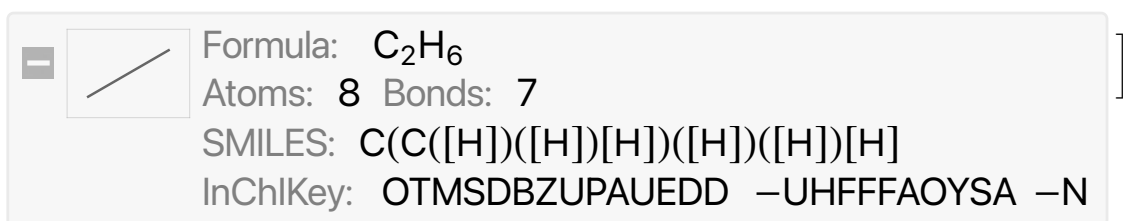
Molecule [



```
In[*]:= Molecule["C(C([H])([H])[H])([H])([H])[H]"
  |molécula |c... |constante
```

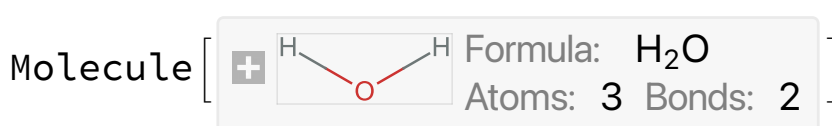
Out[*]=

Molecule [



```
In[*]:= Molecule["O([H])[H]"
  |molécula |notación O
```

Out[*]=



Podemos pedir que nos diga de qué molécula estamos hablando:

```
In[*]:= Interpreter["Chemical"] ["H2O"]  
[intérprete
```

Out[*]=

water


```
In[*]:= Interpreter["Chemical"] ["C2H6"]  
[intérprete
```

Out[*]=

ethane

```
In[*]:= Interpreter["Chemical"] ["C8H10N4O2"]  
[intérprete
```

Out[*]=

```
Failure [  Message: No chemical interpretation found. Try  
Tag: InterpretationFailure  
Type: Chemical  
Input: C8H10N4O2
```

Podemos escribir la fórmula del compuesto a partir del nombre sistemático del mismo:

In[*]:= Molecule["carbon dioxide"]
 [molécula

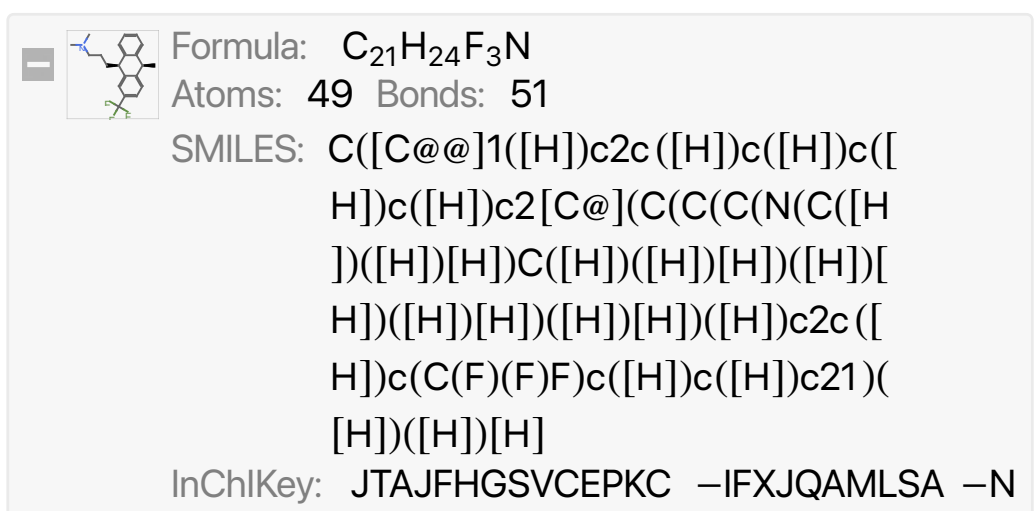
Out[*]=



In[*]:= Molecule["N,N-dimethyl-3-[(9R,10S)-10-methyl-2-(trifluoromethyl)-9,10-dihydroanthracen-9-yl]propan-1-amine"]
 [molécula [··[valor numérico

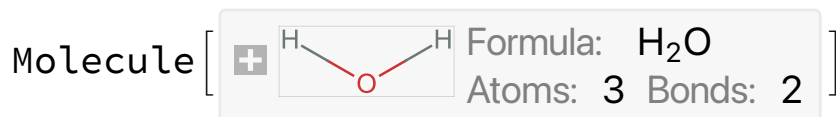
Out[*]=

Molecule [



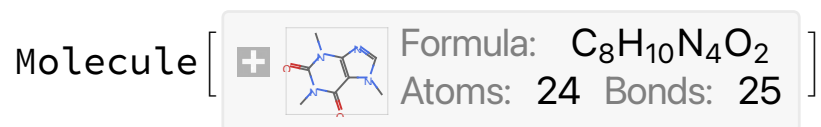
In[*]:= Molecule["dihydrogen oxide"]
 [molécula

Out[*]=



```
In[*]:= Molecule["1,3,7-trimethylxanthine"]  
[molécula
```

Out[*]=



Nos puede interesar alguna propiedad de la molécula, como su masa molecular:

```
In[*]:= MoleculeValue[  
  [valor de molécula  
    Entity["Chemical", "Water"], "MolecularMass"]  
  [entidad
```

```
Out[*]=  
18.015 u
```

```
In[*]:= MoleculeValue[  
  [valor de molécula  
    Entity["Chemical", "Ethane"], "MolecularMass"]  
  [entidad
```

```
Out[*]=  
30.070 u
```

```
In[*]:= MoleculeValue[  
  [valor de molécula  
    Entity["Chemical", "Caffeine"], "MolecularMass"]  
  [entidad
```

```
Out[*]=  
194.19 u
```

Nos puede interesar alguna propiedad de la molécula, como su Identificador Químico Internacional, InChIKey:

```
In[*]:= MoleculeValue [  
  [valor de molécula  
    Entity["Chemical", "Water"], "InChIKey"]  
  [entidad
```

Out[*]=

```
InChIKey  
XLYOFNOQVPJJNP-UHFFFAOYSA-  
N
```

```
In[*]:= MoleculeValue [  
  [valor de molécula  
    Entity["Chemical", "Ethane"], "InChIKey"]  
  [entidad
```

Out[*]=

```
InChIKey  
OTMSDBZUPAUEDD-UHFFFAOYSA-  
N
```

```
In[*]:= MoleculeValue [  
  [valor de molécula  
    Entity["Chemical", "Caffeine"], "InChIKey"]  
  [entidad
```

Out[*]=

```
InChIKey  
RYYVLZVUVIJVGH-UHFFFAOYSA-N
```

Nos puede interesar escribir la fórmula molecular del compuesto químico:

```
In[*]:= MoleculeValue[Entity["Chemical", "Water"],  
[valor de molécula [entidad  
"MolecularFormulaString"]
```

```
Out[*]=  
H2O
```

```
In[*]:= MoleculeValue[Entity["Chemical", "Ethane"],  
[valor de molécula [entidad  
"MolecularFormulaString"]
```

```
Out[*]=  
C2H6
```

```
In[*]:= MoleculeValue[Entity["Chemical", "Caffeine"],  
[valor de molécula [entidad  
"MolecularFormulaString"]
```

```
Out[*]=  
C8H10N4O2
```

Nos puede interesar escribir el identificador del compuesto químico en la mayor base de datos mundial (PubChem):

```
In[*]:= MoleculeValue[Entity["Chemical", "Water"],  
  [valor de molécula [entidad  
    "PubChemCompoundID"]
```

Out[*]=

```
{ PubChem compound 962 }
```

```
In[*]:= MoleculeValue[Entity["Chemical", "Ethane"],  
  [valor de molécula [entidad  
    "PubChemCompoundID"]
```

Out[*]=

```
{ PubChem compound 6324 }
```

```
In[*]:= MoleculeValue[Entity["Chemical", "Caffeine"],  
  [valor de molécula [entidad  
    "PubChemCompoundID"]
```

Out[*]=

```
{ PubChem compound 2519 }
```

Nos puede interesar escribir aquellas sustancias que puedan tener la combinación de la estructura química definida en PubChemCompoundID:

```
In[32]:= MoleculeValue[Entity["Chemical", "Water"],  
_valor de molécula _entidad  
"PubChemSubstanceID"];
```

```
In[*]:= MoleculeValue[Entity["Chemical", "Ethane"],  
_valor de molécula _entidad  
"PubChemSubstanceID"];
```

```
In[*]:= MoleculeValue[Entity["Chemical", "Caffeine"],  
_valor de molécula _entidad  
"PubChemSubstanceID"];
```