

REACCIONES QUÍMICAS

EQUILIBRIOS QUÍMICOS

Creamos una reacción química en formato Entity:

```
In[9]:= ChemicalReaction[<|
  reacción química
  Entity["Chemical", "ZincHydroxide"] → 1,
  entidad
  Entity["Chemical", "HydrogenChloride"] → 1|> → <|
  entidad
  Entity["Chemical", "ZincChloride"] → 1,
  entidad
  Entity["Chemical", "Water"] → 1|>]

Out[9]= ChemicalReaction [ Zn(OH)2 + HCl → ZnCl2 + H2O ]
```

Podemos preguntar si la reacción está o no ajustada:

```
In[10]:= ReactionBalancedQ[%]
  ¿reacción balanceada?

Out[10]= False
```

Por tanto, debemos ajustarla:

```
In[11]:= ReactionBalance [%%]
  balancea reacción

Out[11]= ChemicalReaction [ Zn(OH)2 + 2 HCl → ZnCl2 + 2 H2O ]
```

Creamos otra reacción química, pero en este caso en formato de cadena y la ajustamos:

```
In[12]:= ReactionBalance[
  balancea reacción
  "AlPO4 + Ca(NO3)2 -> Al(NO3)3 + Ca3(PO4)2"]
```

```
Out[12]= ChemicalReaction[
  2 AlPO4 + 3 Ca(NO3)2 -> 2 Al(NO3)3 + Ca3(PO4)2 ]
```

Podemos escribir la reacción ajustada de forma clásica:

```
In[13]:= %["EquationDisplay"] // TraditionalForm
  forma tradicional
```

```
Out[13]//TraditionalForm= 2 AlPO4 + 3 Ca(NO3)2
  -> 2 Al(NO3)3 + Ca3(PO4)2
```

O también la podemos escribir en formato de cadena:

```
In[14]:= %%["EquationString"]
```

Out[14]=

```
2AlPO4 + 3Ca(NO3)2 -> 2Al(NO3)3 + Ca3(PO4)2
```

Creamos una reacción química, en formato de cadena y la ajustamos:

```
In[15]:= ChemicalReaction[
  reacción química
  "Bi(NO3)3 + NaOH -> Bi(OH)3 + NaNO3"]
```

Out[15]=

```
ChemicalReaction[ Bi(NO3)3 + NaOH -> Bi(OH)3 + NaNO3 ]
```

Podemos obtener el recuento de reactivos:

```
In[16]:= %["ReactantCounts"]
```

Out[16]=

```
< | Bi(NO3)3 -> 1, NaOH -> 1 | >
```

Otra reacción química, en formato de cadena:

```
In[17]:= ReactionBalance[
  balancea reacción
  "FeCl2 + Na3PO4 -> Fe3(P04)2 + NaCl"]
```

Out[17]=

```
ChemicalReaction [ 3 FeCl2 + 2 Na3PO4 → Fe3(PO4)2 + 6 NaCl ]
```

Podemos preguntar si la reacción está o no ajustada:

```
In[37]:= ReactionBalancedQ[ChemicalReaction[
  ¿reacción balanceada?  reacción química
  "FeCl2 + Na3PO4 -> Fe3(P04)2 + NaCl"]]
```

Out[37]=

False

```
In[36]:= ReactionBalancedQ[ChemicalReaction[
  ¿reacción balanceada?  reacción química
  "3FeCl2 + 2Na3PO4 -> Fe3(P04)2 + 6NaCl"]]
```

Out[36]=

True

Podemos preguntar si la reacción está o no ajustada por diferentes conjuntos de coeficientes:

```

In[38]:= ReactionBalancedQ /@ {ChemicalReaction[<|
  ¿reacción balanceada?      [reacción química
    ChemicalFormula[{"C" → 1, "O" → 1}] → 1,
    [fórmula química          [constante [notación O
    ChemicalFormula[{"C" → 1, "O" → 2}] → 1,
    [fórmula química          [constante [notación O
    ChemicalFormula[{"H" → 2}] → 7|> → <|
    [fórmula química
    ChemicalFormula[{"C" → 1, "H" → 4}] → 2,
    [fórmula química          [constante
    ChemicalFormula[{"H" → 2, "O" → 1}] → 3|>],
    [fórmula química          [notación O
  ChemicalReaction[<|ChemicalFormula[
    [reacción química          [fórmula química
      {"C" → 1, "O" → 1}] → 2,
      [constante [notación O
    ChemicalFormula[{"C" → 1, "O" → 2}] → 1,
    [fórmula química          [constante [notación O
    ChemicalFormula[{"H" → 2}] → 10|> → <|
    [fórmula química
    ChemicalFormula[{"C" → 1, "H" → 4}] → 3,
    [fórmula química          [constante
    ChemicalFormula[{"H" → 2, "O" → 1}] → 4|>],
    [fórmula química          [notación O
  ChemicalReaction[<|ChemicalFormula[
    [reacción química          [fórmula química
      {"C" → 1, "O" → 1}] → 1,
      [constante [notación O
    ChemicalFormula[{"C" → 1, "O" → 2}] → 2,
    [fórmula química          [constante [notación O
    ChemicalFormula[{"H" → 2}] → 11|> → <|
    [fórmula química
    ChemicalFormula[{"C" → 1, "H" → 4}] → 3,
    [fórmula química          [constante
    ChemicalFormula[{"H" → 2, "O" → 1}] → 5|>}]
    [fórmula química          [notación O

```

Out[38]=

{True, True, True}

Una reacción química de oxido reducción:

```
In[18]:= ReactionBalance[
  balancea reacción
  ChemicalReaction[<|ChemicalFormula[{"Cu" → 1}, <|
    [reacción química      [fórmula química
      "Phase" → "Aqueous", "NetCharge" → 1|>] → 1,
    ChemicalFormula[{"Fe" → 1}, <|
      [fórmula química
        "Phase" → "Solid"|>] → 1|> → <|
    ChemicalFormula[{"Fe" → 1}, <|
      [fórmula química
        "Phase" → "Aqueous", "NetCharge" → 3|>] → 1,
    ChemicalFormula[{"Cu" → 1}, <|
      [fórmula química
        "Phase" → "Solid"|>] → 1|>]]]
```

Out[18]=

```
ChemicalReaction [ 3 Cu+(aq) + Fe(s) → Fe3+(aq) + 3 Cu(s) ]
```

Una reacción redox más complicada:

```

In[34]:= ReactionBalance[
  [balancea reacción
    ChemicalReaction[<|ChemicalFormula[{"Cr" → 1,
      [reacción química      [fórmula química
        {"N" → 2, "H" → 4, "C" → 1, "O" → 1} → 6} →
          [valor numérico      [constante [notación O
        4, {"Cr" → 1, {"C" → 1, "N" → 1} → 6} → 3}}] →
          [constante [valor numérico
    1, ChemicalFormula[{"K" → 1, "Mn" → 1,
      [fórmula química
        "O" → 4}] → 1, ChemicalFormula[
          [notación O      [fórmula química
        {"H" → 2, "S" → 1, "O" → 4}] → 1|> → <|
          [notación O
    ChemicalFormula[{"K" → 2, "Cr" → 2, "O" → 7}] →
      [fórmula química      [notación O
    1, ChemicalFormula[
      [fórmula química
        {"Mn" → 1, "S" → 1, "O" → 4}] → 1,
          [notación O
    ChemicalFormula[{"C" → 1, "O" → 2}] → 1,
      [fórmula química      [constante [notación O
    ChemicalFormula[{"K" → 1, "N" → 1, "O" → 3}] → 1,
      [fórmula química      [valor nu... [notación O
    ChemicalFormula[{"K" → 2, "S" → 1, "O" → 4}] → 1,
      [fórmula química      [notación O
    ChemicalFormula[{"H" → 2, "O" → 1}] → 1|>]]
      [fórmula química      [notación O

```

Out[34]=

```

ChemicalReaction[
  [
    10 (Cr(N2H4CO)6)4 (Cr(CN)6)3 + 1176 KMnO4 + 1399 H2SO4 →
    35 K2Cr2O7 + 1176 MnSO4 + 420 CO2 + 660 KNO3 + 223 K2SO4 + 1879 H2O ]

```

Escribimos la reacción de solvatación (hidrólisis) del hidróxido de sodio:

```
In[19]:= ChemicalReaction["NaOH(s) -> Na+(aq) + OH-(aq)"]
[reacción química]
```

Out[19]=

```
ChemicalReaction[NaOH(s) -> Na+(aq) + OH-(aq)]
```

La reacción inversa:

```
In[20]:= %["ReverseReaction"]
```

Out[20]=

```
ChemicalReaction[Na+(aq) + OH-(aq) -> NaOH(s)]
```

Una reacción de combustión:

```
In[21]:= ReactionBalance[
[balancea reacción]
```

```
ChemicalReaction[<|ChemicalFormula[
[reacción química] [fórmula química]
```

```
{"C" -> 8, "H" -> 10, "N" -> 4, "O" -> 2}] -> 1,
[constante] [valor nu... [notación O]
```

```
ChemicalFormula[{"O" -> 2}] -> 1|> -> <|
[fórmula química] [notación O]
```

```
ChemicalFormula[
[fórmula química]
```

```
{"C" -> 7, "H" -> 8, "N" -> 4, "O" -> 2}] -> 1,
[constante] [valor nu... [notación O]
```

```
ChemicalFormula[{"H" -> 2, "O" -> 1}] -> 1,
[fórmula química] [notación O]
```

```
ChemicalFormula[{"C" -> 1, "O" -> 2}] -> 1|>]]
[fórmula química] [constante] [notación O]
```

Out[21]=

```
ChemicalReaction[2 C8H10N4O2 + 3 O2 -> 2 C7H8N4O2 + 2 H2O + 2 CO2]
```

Otra reacción de combustión:

```
In[22]:= ChemicalReaction[<|
  [reacción química
    Entity["Chemical", "2Methylpropane"] → 2,
    [entidad
      Entity["Chemical", "MolecularOxygen"] →
    [entidad
      13|> → <|Entity["Chemical", "CarbonDioxide"] →
    [entidad
      8, Entity["Chemical", "Water"] →
    [entidad
      10|>] ["ReactionRule"]
```

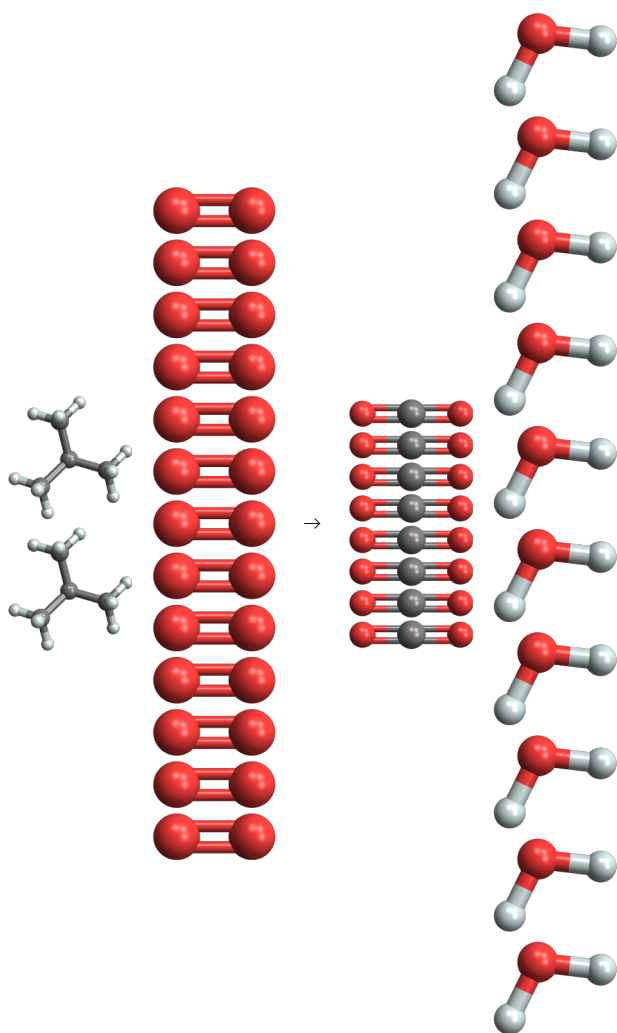
Out[22]=

```
<| [isobutane] → 2, [oxygen] → 13 |> →
<| [carbon dioxide] → 8, [water] → 10 |>
```

Podemos expresar su estequiometría usando gráficos 3D:

```
In[23]:= GraphicsRow /@ KeyValueMap[
  [fila de gráficos [aplica a claves y valores
    GraphicsColumn[ConstantArray[MoleculePlot3D[
    [columna de gráficos [arreglo constante [representación 3D de molé
      #1], #2], ImageSize → 80] &] /@
    [tamaño de imagen
      ChemicalReaction[<|Entity["Chemical",
    [reacción química [entidad
      "2Methylpropane"] → 2, Entity[
    [entidad
      "Chemical", "MolecularOxygen"] → 13|> → <|
      Entity["Chemical", "CarbonDioxide"] → 8,
    [entidad
      Entity["Chemical", "Water"] → 10|>] [
    [entidad
      "ReactionRule"]
```


Out[23]=




Si una reacción no se puede equilibrar de forma única, se devuelve el equilibrio con la suma más baja de los coeficientes estequiométricos:

```

In[*]:= ReactionBalance[ChemicalReaction[<|
  [balancea reacción      [reacción química
    ChemicalFormula[{"C" → 1, "O" → 1}] → 1,
    [fórmula química      [constante [notación O
    ChemicalFormula[{"C" → 1, "O" → 2}] → 1,
    [fórmula química      [constante [notación O
    ChemicalFormula[{"H" → 2}] → 1|> → <|
    [fórmula química
    ChemicalFormula[{"C" → 1, "H" → 4}] → 1,
    [fórmula química      [constante
    ChemicalFormula[{"H" → 2, "O" → 1}] → 1|>]]
    [fórmula química      [notación O

```

 **ReactionBalance** : The reaction $\text{CO} + \text{CO}_2 + \text{H}_2 \rightarrow \text{CH}_4 + \text{H}_2\text{O}$ cannot be balanced uniquely. Returning reaction with the lowest sum of stoichiometric coefficients.

Out[*]=

```

ChemicalReaction [ CO + CO2 + 7 H2 → 2 CH4 + 3 H2O ]

```

Un equilibrio diferente de la misma reacción:

```

In[*]:= ReactionBalancedQ[ChemicalReaction[<|
  [¿reacción balanceada?  [reacción química
    ChemicalFormula[{"C" → 1, "O" → 1}] → 1,
    [fórmula química      [constante [notación O
    ChemicalFormula[{"C" → 1, "O" → 2}] → 2,
    [fórmula química      [constante [notación O
    ChemicalFormula[{"H" → 2}] → 11|> → <|
    [fórmula química
    ChemicalFormula[{"C" → 1, "H" → 4}] → 3,
    [fórmula química      [constante
    ChemicalFormula[{"H" → 2, "O" → 1}] → 5|>]]
    [fórmula química      [notación O

```

Out[*]=

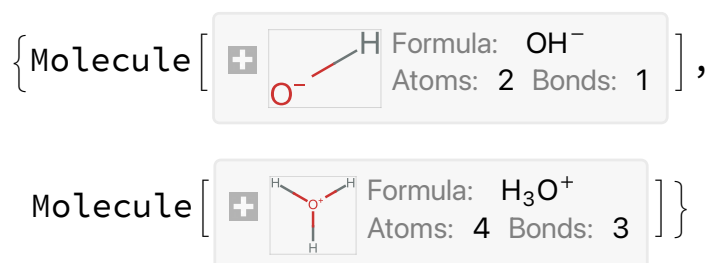
True

APLICACIONES

Apliquemos a la reacción de autoionización del agua:

```
In[24]:= ApplyReaction[PatternReaction[
  aplica reacción      reacción de patrones de molécula
  "[H:1][O:2][H:3].[H:4][O:5][H:6]>>[O-:2][H:3].[
    notación O      notación O      notación O
    H:4][O+:5]([H:1])[H:6]",
    notación O
  {Molecule["water"], Molecule["water"]}]]
  molécula      molécula
```

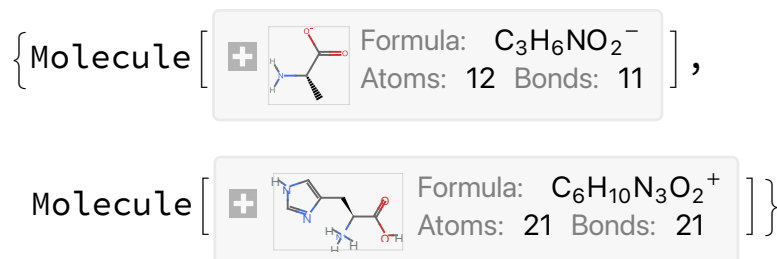
Out[24]=



Apliquemos a la reacción entre un ácido orgánico (alanina) y una base (histidina):

```
In[25]:= ApplyReaction[PatternReaction[
  aplica reacción      reacción de patrones de molécula
  "[C:1](=[O:2])[O:3][H:4].[NX3:5][CX4:6]>>[C:1](
    constante notac... notación O      constante
    =[O:2])[O-:3].[N+:5]([H:4])[C:6]",
    notac... notació... valor numérico constante
  {Molecule["alanine"], Molecule["histidine"]}]]
  molécula      molécula
```

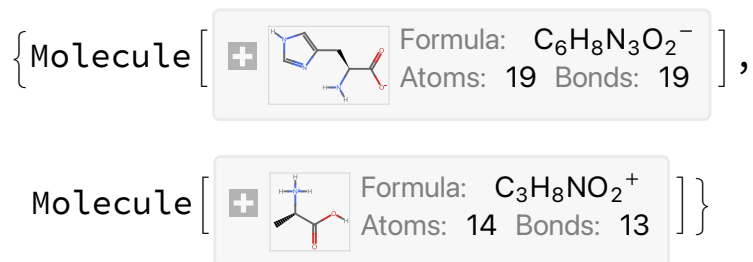
Out[25]=



Apliquemos la misma reacción con los reactivos invertidos, tratando la histidina como ácido y la alanina como base:

```
In[26]:= ApplyReaction[PatternReaction[
  aplica reacción      [reacción de patrones de molécula
    "[C:1] (= [O:2]) [O:3] [H:4] . [NX3:5] [CX4:6] >> [C:1] (
      [constante] [notac... [notación O                                [constante
        = [O:2]) [O-:3] . [N+:5] ([H:4]) [C:6]" ,
          [notac... [notació... [valor numérico   [constante
            {Molecule["histidine"], Molecule["alanine"]}]]
              [molécula                                [molécula
```

Out[26]=



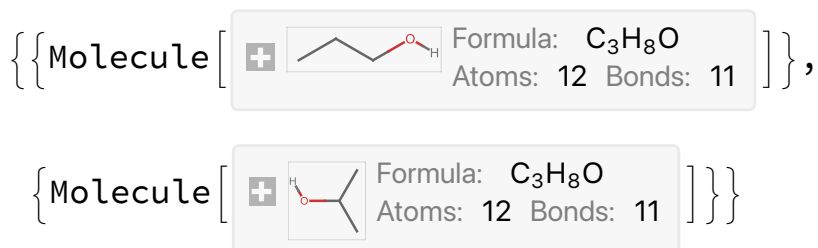
Aplicamos a la reacción de conversión de un alqueno en alcohol:

```

In[27]:= ApplyReaction[
  aplica reacción
  PatternReaction[{MoleculePattern[{"C", "C"},
    reacción de patrones d... patrón de molécula [con... constante
    {Bond[{1, 2}, "Double"]}],
    enlace
    MoleculePattern[{"O"}, {}]}] →
  patrón de molécula [notación O
  {MoleculePattern[{"C", "C", "O"}, {Bond[{1, 2},
    patrón de molécula [con... [con... [notac... [enlace
    "Single"], Bond[{2, 3}, "Single"]]}]},
    enlace
    {{1, 1} → {1, 1}, {1, 2} → {1, 2},
    {2, 1} → {1, 3}}],
  {Entity["Chemical", "Propylene"],
    entidad
    Entity["Chemical", "Water"]}, All]
    entidad [todo

```

Out[27]=



Encuentre entidades químicas coincidentes para los productos:

```

In[28]:= % /. m_Molecule :-> ToEntity[m]
          [molécula [convierte en enti

```

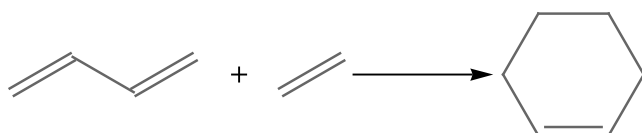
Out[28]=

{ { N-propanol }, { 2-propanol, isopropanol } }

Cree un patrón de la reacción de Diels-Alder a partir de una cadena SMARTS de reacción:

```
In[29]:= dielsAlder = PatternReaction[
    reacción de patrones de molécula
    "[C:1]=[C:2][C:3]=[C:4].[C:5]=[C:6]>>[C:1]1[C:2
    const... cons...const... const... const... constanteconst... conste
    ]=[C:3][C:4][C:5][C:6]1"
    cons...cons...cons...constante
```

Out[29]=



Podemos escribir una función que devuelva reacciones químicas de combustión balanceadas:

```
In[*]:= combustionReaction[mol_? (MoleculeFreeQ[
    libre de patrón de molécula?
    Atom[Except["C" | "H" | "O"]])] :=
    átomo [excepto [constante [notación O
    ReactionBalance[ChemicalReaction[
    balancea reacción [reacción química
    {mol, Entity["Chemical", "MolecularOxygen"]} →
    entidad
    {Entity["Chemical", "CarbonDioxide"],
    entidad
    Entity["Chemical", "Water"]}] ] ]
```

```
In[*]:= combustionReaction /@
    {"benzene", "cyclohexane", "anthracene"}
```

Out[*]=

```
{ChemicalReaction[ 2 C6H6 + 15 O2 → 12 CO2 + 6 H2O ],
ChemicalReaction[ C6H12 + 9 O2 → 6 CO2 + 6 H2O ],
ChemicalReaction[ 2 C14H10 + 33 O2 → 28 CO2 + 10 H2O ] }
```