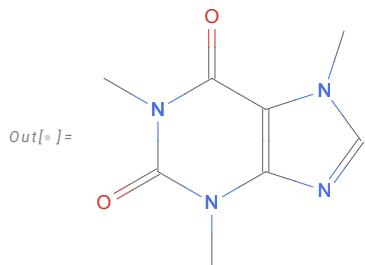


# PROPIEDADES ESPECÍFICAS DE LOS COMPUESTOS QUÍMICOS

## DATOS QUÍMICOS

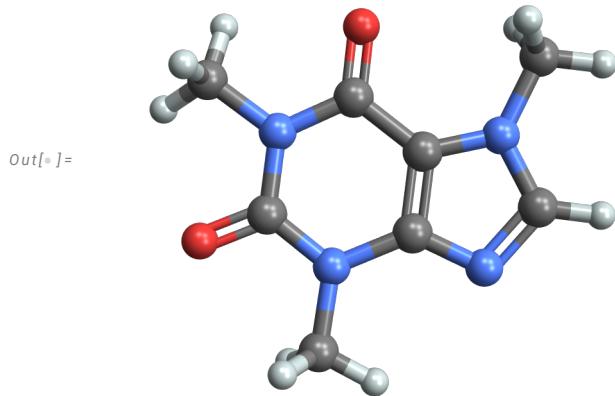
La representación de estructura básica de la cafeína:

```
In[=]:= ChemicalData["Caffeine"]  
|datos químicos
```



En tres dimensiones:

```
In[=]:= ChemicalData["Caffeine", "MoleculePlot"]  
|datos químicos  
|representación de moléculas
```



Algunas propiedades del compuesto:

*In[*<sup>8</sup>*]:=* **ChemicalData["Caffeine", "MolarMass"]**  
*[*datos químicos*]*

*Out[*<sup>8</sup>*]=* 194.19 g/mol

*In[*<sup>9</sup>*]:=* **ChemicalData["Caffeine", "InChI"]**  
*[*datos químicos*]*

*Out[*<sup>9</sup>*]=* InChI=1/C8H10N4O2/c1-10-4-9-6-5(10)7(13)12(3)8(14)11(6)2/h4H,1-3H3

*In[*<sup>10</sup>*]:=* **ChemicalData["Caffeine", "SMILES"]**  
*[*datos químicos*]*

*Out[*<sup>10</sup>*]=* CN1C=NC2=C1C(=O)N(C(=O)N2C)C

*In[*<sup>11</sup>*]:=* **ChemicalData["Caffeine", "IUPACName"]**  
*[*datos químicos*]* *[*nomenclatura IU*]*

*Out[*<sup>11</sup>*]=* 1,3,7-trimethylpurine-2,6-dione

*In[*<sup>12</sup>*]:=* **ChemicalData["Caffeine", "CASNumber"]**  
*[*datos químicos*]*

*Out[*<sup>12</sup>*]=* CAS58-08-2

*In[*<sup>13</sup>*]:=* **ChemicalData["Caffeine", "CIDNumber"]**  
*[*datos químicos*]*

*Out[*<sup>13</sup>*]=* CID2519

In[1]:= **ChemicalData["Caffeine", "Name"]**  
|datos químicos

Out[1]= caffeine

In[2]:= **ChemicalData["Caffeine", "Formula"]**  
|datos químicos

Out[2]= C<sub>8</sub>H<sub>10</sub>N<sub>4</sub>O<sub>2</sub>

In[3]:= **ChemicalData["Caffeine", "HillFormula"]**  
|datos químicos

Out[3]= C<sub>8</sub>H<sub>10</sub>N<sub>4</sub>O<sub>2</sub>

In[4]:= **ChemicalData["Caffeine",  
"HillFormulaString"]**

Out[4]= C8H10N4O2

C8H10N4O2

# PROPIEDADES DE LOS COMPUESTOS QUÍMICOS

**Más propiedades de compuestos:**

In[8]:= **ChemicalData["MagnesiumOxide", "CASNumber"]**  
 [datos químicos]

Out[8]= CAS1309-48-4

In[9]:= **ChemicalData["CAS1309-48-4"]**  
 [datos químicos]

Out[9]= O=Mg

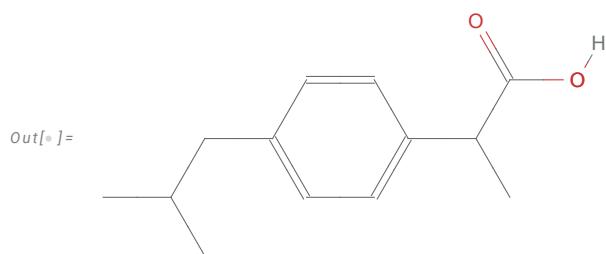
In[10]:= **ChemicalData["Ibuprofen", "CASNumber"]**  
 [datos químicos]

Out[10]= CAS15687-27-1

In[11]:= **ChemicalData["Ibuprofen", "CIDNumber"]**  
 [datos químicos]

Out[11]= CID3672

In[12]:= **ChemicalData["CID3672"]**  
 [datos químicos]



In[1]:= **ChemicalData["AceticAcid", "FormulaString"]**  
| datos químicos

Out[1]= CH<sub>3</sub>CO<sub>2</sub>H

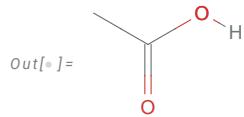
In[2]:= **ChemicalData["AceticAcid", "Formula"]**  
| datos químicos

Out[2]= CH<sub>3</sub>CO<sub>2</sub>H

In[3]:= **ChemicalData["AceticAcid", "HillFormula"]**  
| datos químicos

Out[3]= C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>O<sub>2</sub>

In[4]:= **ChemicalData["CH3CO2H"]**  
| datos químicos



In[5]:= **ChemicalData["SodiumBenzoate", "Formula"]**  
| datos químicos

Out[5]= C<sub>6</sub>H<sub>5</sub>COONa

In[6]:= **ChemicalData["AceticAcid", "HillFormula"]**  
| datos químicos

Out[6]= C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>O<sub>2</sub>

In[6]:= **ChemicalData["Aspartame", "SMILES"]**  
|datos químicos

Out[6]= COC(=O)C(CC1=CC=CC=C1)NC(=O)C(CC(=O)[O-])[NH3+]

In[7]:= **ChemicalData["2Acetonaphthone", "InChI"]**  
|datos químicos

Out[7]= InChI=1/C12H10O/c1-9(13)11-7-6-10-4-2-3-5-12(10)8-11/h2-8H,1H3

# NOMENCLATURA

**Podemos obtener una lista alternativa de nombres de un compuesto:**

```
In[1]:= ChemicalData["EthidiumBromide",
|datos químicos
"AlternateStandardNames"]
```

```
Out[1]= {3,8Diamino5Ethyl6PhenylphenanthridiniumBr:
omide,
5Ethyl6PhenylPhenanthridin5Ium3,8
DiamineBromide,
EtBr, HomidiumBromide}
```

```
In[2]:= ChemicalData["EtBr", "StandardName"]
|datos químicos
```

```
Out[2]= EthidiumBromide
```

```
In[3]:= ChemicalData["DIAD", "AlternateNames"]
|datos químicos
```

```
Out[3]= {azodicarbonic acid diisopropyl ester,
DIAD, diazenedicarboxylic acid,
bis(1-methylethyl)ester, isopropyl
(NE)-N-isopropoxycarbonyliminocarbamate,
(NE)-N-isopropoxycarbonyliminocarbamic
acid isopropyl ester,
propan-2-yl (NE)-N-propan-2-
yloxycarbonyliminocarbamate}
```

```
In[6]:= ChemicalData[  
|datos químicos  
"SulfuricAcid", "AlternateNames"]
```

```
Out[6]= {anhydrous sulfuric acid,  
dihydrogen sulfate,  
oil of vitriol, sulphuric acid}
```

**Podemos obtener el nombre en inglés de un compuesto químico:**

```
In[7]:= ChemicalData["MagnesiumHydroxide", "Name"]  
|datos químicos
```

```
Out[7]= magnesium hydroxide
```

```
In[8]:= ChemicalData["SulfuricAcid", "Name"]  
|datos químicos
```

```
Out[8]= sulfuric acid
```

```
In[9]:= ChemicalData["OxalicAcid", "Name"]  
|datos químicos
```

```
Out[9]= oxalic acid
```

# BÚSQUEDAS DE COMPUESTOS

Podemos buscar una lista de grupos de compuestos químicos:

```
In[4]:= ChemicalData["Classes"] // Shallow
          | datos químicos           | somero
```

```
Out[4]//Shallow= { acid anhydrides , acid halides ,
                   acids , alcohols , aldehydes ,
                   aldoses , aliphatic ketones , alkanes ,
                   alkenes , alkyl halides , <<128>> }
```

O los compuestos que cumplen una determinada característica, dentro de los grupos :

```
In[5]:= ChemicalData["Liquid"] // Shallow
          | datos químicos           | somero
```

```
Out[5]//Shallow= { liquid hydrogen , liquid helium ,
                   liquid methane , water , water-18 O ,
                   heavy water , liquid neon , hydrogen cyanide ,
                   carbon-13C monoxide , liquid nitrogen , <<10 464>> }
```

```
In[6]:= ChemicalData["Heterocyclic"] // Shallow
          | datos químicos           | somero
```

```
Out[6]//Shallow= { aziridine , ethylene oxide , ethylene oxide-13 C2 ,
                   ethylene-d 4oxide , boron carbide , propyleneimine ,
                   azetidine , propylene oxide , (R)-(+)-propylene oxide ,
                   (S)-(-)-propylene oxide , <<10 954>> }
```

**Probar si una sustancia química pertenece a una determinada clase:**

In[6]:= ChemicalData["5,7Dichloroisatin", "Indoles"]  
|datos químicos

Out[6]= True

In[7]:= ChemicalData["Adenine", "AminoAcids"]  
|datos químicos

Out[7]= False

**Escribir una lista de compuestos de estroncio:**

In[=]:= **ChemicalData[{"Strontium", "Compound"}]**  
| datos químicos

Out[=]=

{ strontium , strontium hydride , strontium oxide , strontium peroxide ,  
strontium sulfide , strontium hydroxide , strontium fluoride ,  
strontium hydroxide octahydrate , strontium carbonate ,  
strontium hexaboride , strontium chloride , strontium selenide ,  
strontium oxalate , strontium titanate , strontium hydrogenphosphate ,  
strontium sulfate , strontium chromate , strontium acetate ,  
strontium isopropoxide , strontium nitrate , strontium zirconate ,  
strontium selenate , strontium bromide , strontium molybdate ,  
strontium chlorate , strontium bromide hexahydrate ,  
strontium chloride hexahydrate , strontium acetylacetone ,  
strontium perchlorate , strontium lanthanum aluminate ,  
strontium phosphide , strontium iodide , barium strontium tungsten oxide ,  
strontium cyclohexanebutyrate , strontium iodate ,  
strontium bis(2,2,6,6-tetramethyl-3,5-heptanedionate)dihydrate ,  
strontium arsenate ,  
strontium bis(6,6,7,7,8,8,8-heptafluoro-2,2-dimethyl-3,5-octanedionate) ,  
strontium ferrite }

In[=]:= **ChemicalData[**

**[**datos químicos

**{"Strontium", "Compound"}]** **// Shallow**

**[somero**

Out[=]//Shallow= { strontium , strontium hydride ,  
 strontium oxide , strontium peroxide ,  
 strontium sulfide , strontium hydroxide ,  
 strontium fluoride , strontium hydroxide octahydrate ,  
 strontium carbonate , strontium hexaboride , <<29>> }

**Escribir una lista de compuestos de cloro:**

In[=]:= **ChemicalData[{"Chlorine", "Compound"}]** **//**  
**[**datos químicos

**Shallow**

**[somero**

Out[=]//Shallow=

{ deuterium chloride , hydrogen chloride ,  
 lithium chloride , methyl chloride , chloramine ,  
 chloromethane-13 C , hypochlorous acid , ammonium chloride ,  
 chloromethane-d 399.5 atom%D , ammonium-15 nchloride , <<5629>> }

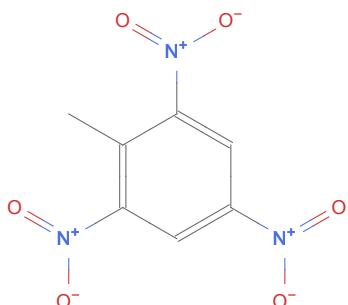
## FORMATOS DE PRESENTACIÓN

**Podemos especificar colores para la escritura de una molécula:**

In[ $\circ$ ]:= ChemicalData["Trinitrotoluene",  
| datos químicos

"ColorStructureDiagram"]

Out[ $\circ$ ]=

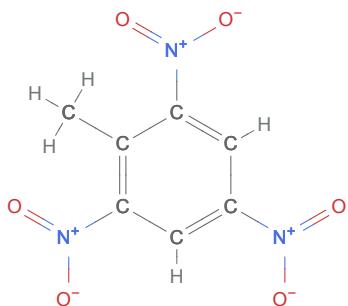


**Se puede visibilizar los hidrógenos de todos los carbonos:**

In[ $\circ$ ]:= ChemicalData["Trinitrotoluene",  
| datos químicos

"CHColorStructureDiagram"]

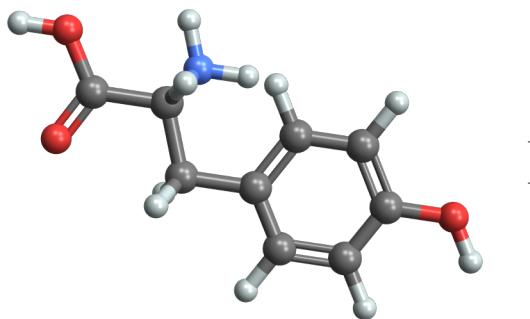
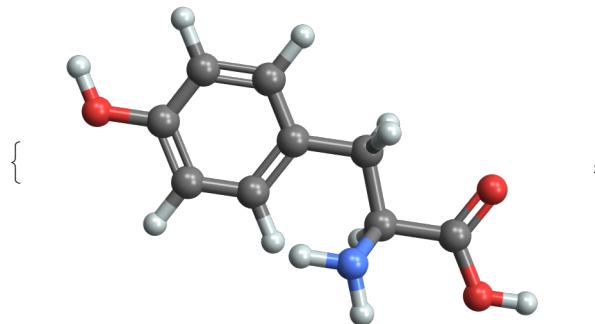
Out[ $\circ$ ]=



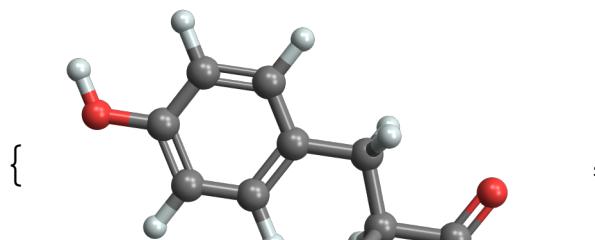
**Podemos visualizar las estructuras en tres dimensiones de dos enantiómeros:**

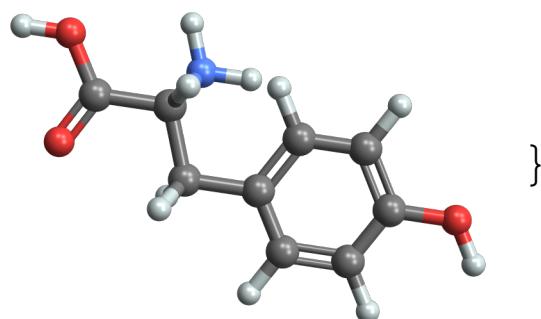
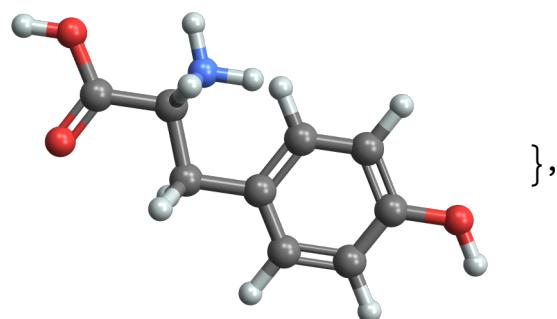
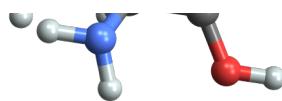
In[6]:= **ChemicalData**[#, "MoleculePlot"] & /@  
|datos químicos| [representación de molécula]  
{"LTyrosine", "DTyrosine"}

Out[6]=



In[39]:=

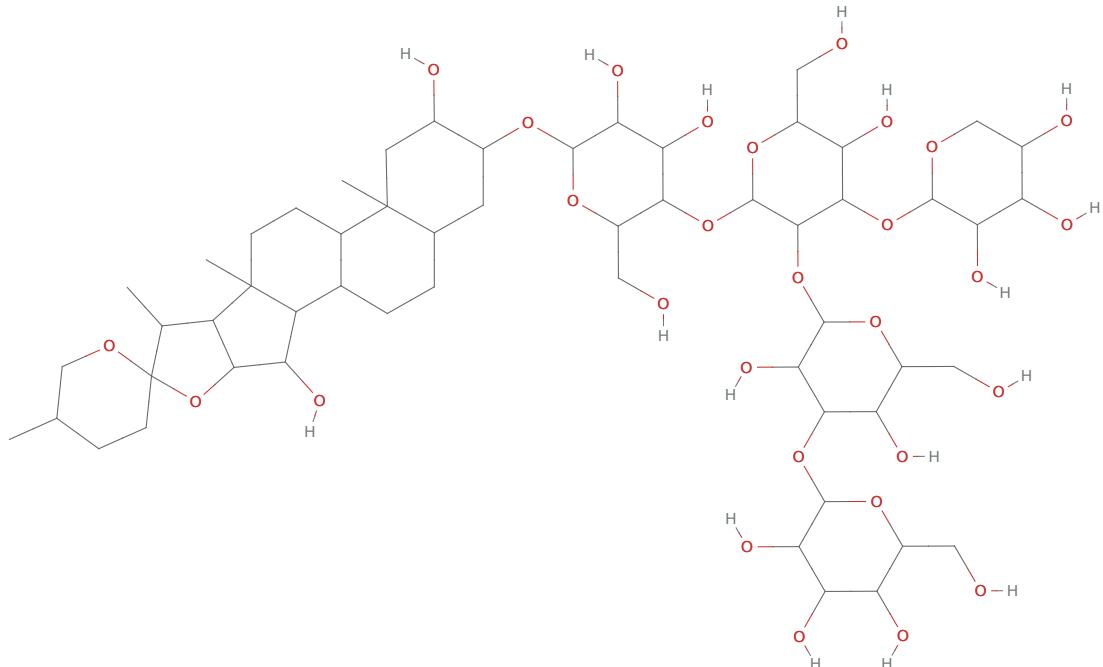




**Podemos visualizar la representación de moléculas complicadas:**

In[=]:= **ChemicalData["Digitonin", "ColorStructureDiagram"]**

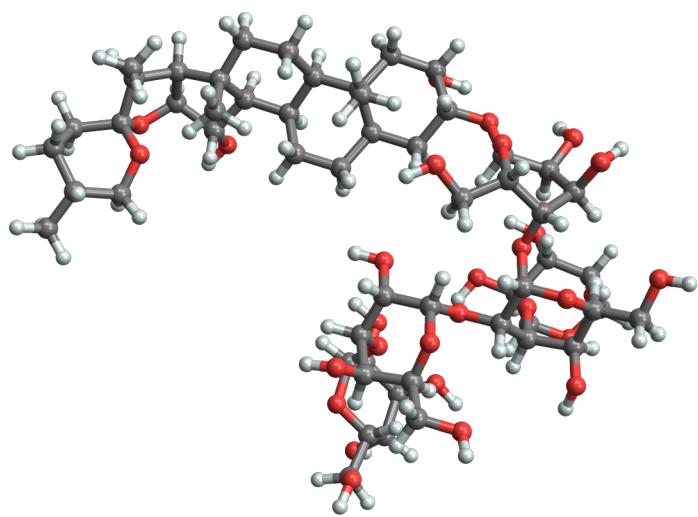
Out[=]=



In[=]:= **ChemicalData["Digitonin", "MoleculePlot"]**

[datos químicos representación de moléculas]

Out[=]=



# BUSQUEDAS

**Podemos encontrar isómeros de cadena:**

```
In[°]:= ChemicalData["C4H8"]
| datos químicos
```

Out[°]=

```
{methylcyclopropane, cyclobutane, 1-butene, cis-2-butene,
trans-2-butene, isobutylene, butene (mixed isomers)}
```

```
In[°]:= ChemicalData["C14H12O"]
| datos químicos
```

Out[°]=

```
{p-styrylphenol, 4-acetyl biphenyl, 2-methylbenzophenone,
fluorene-9-methanol, 3-methylbenzophenone,
cis-stilbene oxide, 4-(4-methylphenyl)benzaldehyde,
3-(4-methylphenyl)benzaldehyde, trans-stilbene oxide,
deoxybenzoin, diphenylacetaldehyde, 4-methylbenzophenone}
```

**Podemos buscar los iones procedentes de un compuesto:**

```
In[°]:= ChemicalData["SodiumOxalate", "Formula"]
| datos químicos
```

Out[°]=

Na2C2O4

```
In[°]:= ChemicalData["SodiumOxalate", "Ions"]
| datos químicos
```

Out[°]=

```
{IonSodium, IonOxalate}
```

```
In[6]:= ChemicalData[
  datos químicos
  "SodiumOxalate", "IonEquivalents"]
```

Out[6]=  
{2, 1}

```
In[7]:= ChemicalData["SodiumOxalate", "IonTally"]
  datos químicos
```

Out[7]=  
{{IonSodium, 2}, {IonOxalate, 1}}  
**Podemos obtener una lista de átomos marcados isotópicamente en una sustancia química:**

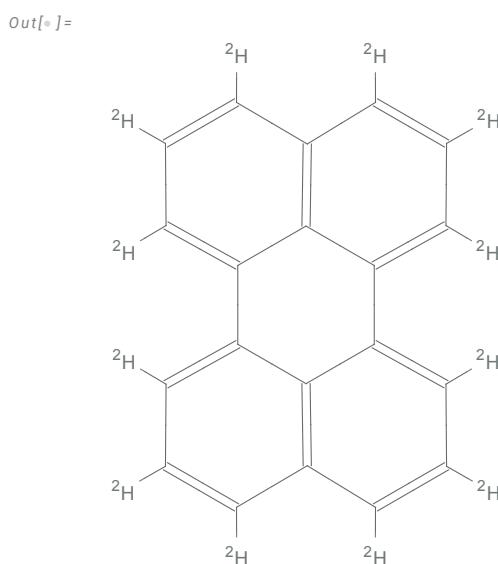
```
In[8]:= ChemicalData["PeryleneD12",
  datos químicos
```

```
"NonStandardIsotopeTally"]
```

Out[8]=  
{{H2, 12}}

```
In[9]:= ChemicalData["PeryleneD12",
  datos químicos
```

```
"ColorStructureDiagram"]
```



**Podemos ver la composición elemental de un compuesto orgánico:**

*In[1]:=* **ChemicalData["Ltryptophan", "IUPACName"]**  
 | datos químicos | nomenclatura IU

*Out[1]=* (2S)-2-azaniumyl-3-(1H-indol-3-yl) propanoate

*In[2]:=* **ChemicalData["Ltryptophan", "ElementTypes"]**  
 | datos químicos

*Out[2]=* {C, H, N, O}

*In[3]:=* **ChemicalData["Ltryptophan", "ElementTally"]**  
 | datos químicos

*Out[3]=* {{C, 11}, {H, 12}, {N, 2}, {O, 2}}

**Obtener todos los tipos de enlaces:**

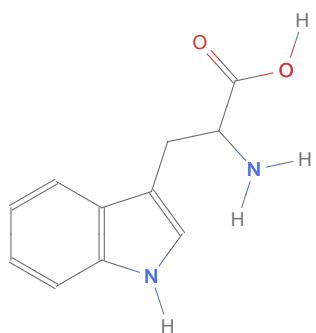
*In[4]:=* **ChemicalData["Ltryptophan", "BondTally"]**  
 | datos químicos

*Out[4]=* {{{{C, C}, 2}, 4}, {{{C, C}, 1}, 7}, {{{C, H}, 1}, 8}, {{{C, N}, 1}, 3}, {{{C, O}, 2}, 1}, {{{C, O}, 1}, 1}, {{{H, N}, 1}, 3}, {{{H, O}, 1}, 1}}

**Su estructura molecular:**

In[1]:= **ChemicalData["Ltryptophan"]**  
|datos químicos

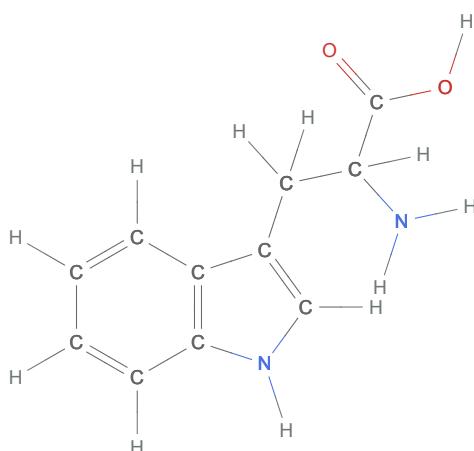
Out[1]=



Con todos los hidrógenos a la vista:

In[2]:= **ChemicalData["Ltryptophan",**  
|datos químicos  
"CHColorStructureDiagram"]

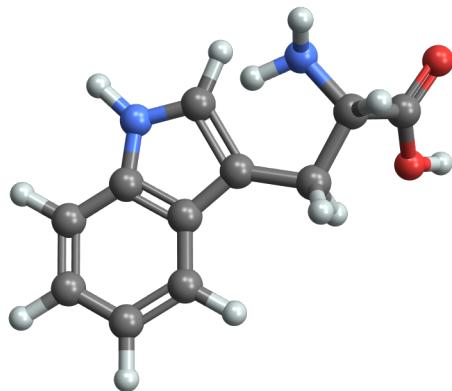
Out[2]=



En tres dimensiones:

In[=]:= **ChemicalData["Ltryptophan", "MoleculePlot"]**  
 datos químicos representación de moléculas

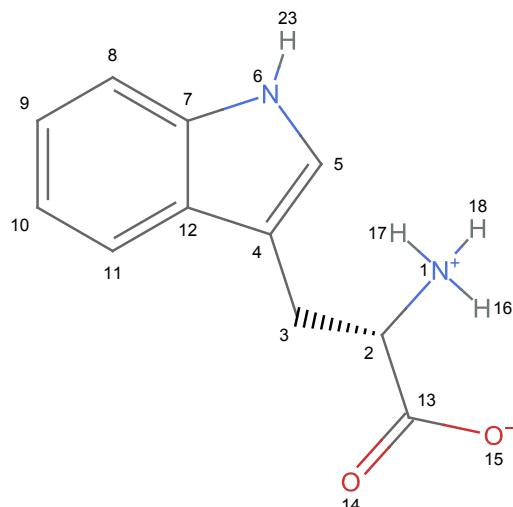
Out[=]=



### Numerar los átomos:

In[=]:= **MoleculePlot[Molecule[**  
 representación de molécula  
 "(2S)-2-azaniumyl-3-(1H-indol-3-yl)  
 propanoate"],  
**AtomLabels → "AtomIndex"]**  
 etiquetas de átomos

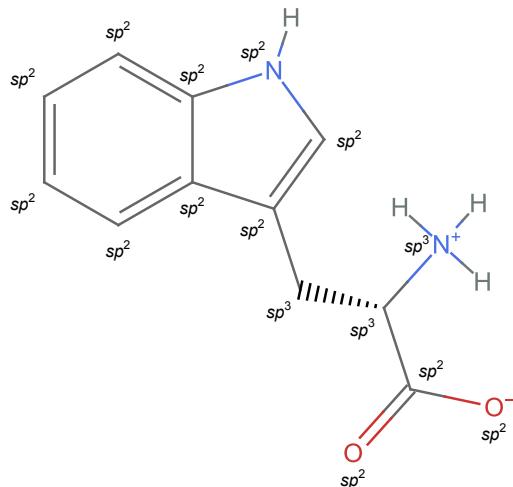
Out[=]=



### Obtener las hibridaciones de los átomos:

```
In[8]:= MoleculePlot[Molecule[
  representación de la molécula
  "(2S)-2-azaniumyl-3-(1H-indol-3-yl)propanoate"], 
  AtomLabels → {Atom[Except["H"]]} →
  [etiquetas de átomos] → [átomo] [excepto]
  MoleculeProperty["OrbitalHybridization"]}]
  [propiedad de molécula]
```

Out[8]=



**Obtenemos las asignaciones de los átomos:**

```
In[9]:= ChemicalData["Ltryptophan", "EdgeRules"]
  [datos químicos] [reglas de aristas]
```

Out[9]=

```
{1 → 2, 2 → 3, 3 → 4, 4 → 5, 5 → 6, 6 → 1, 4 → 7, 7 → 8,
 8 → 9, 9 → 5, 9 → 10, 10 → 11, 10 → 12, 7 → 13, 3 → 14,
 2 → 15, 1 → 16, 6 → 17, 8 → 18, 10 → 19, 12 → 20, 12 → 21,
 12 → 22, 20 → 23, 20 → 24, 21 → 25, 21 → 26, 26 → 27}
```

**Los órdenes de enlace para cada átomo:**

```
In[10]:= ChemicalData["Ltryptophan", "EdgeTypes"]
  [datos químicos]
```

Out[10]=

```
{Single, Double, Single, Double, Single, Double, Single,
  Single, Double, Single, Single, Single, Single, Single,
  Single, Single, Single, Single, Single, Single, Single,
  Single, Single, Single, Single, Double, Single, Single}
```

**El tipo de átomo en cada vértice:**

*In[°]:= ChemicalData["Ltryptophan", "VertexTypes"]*  
 | datos químicos

*Out[°]=*  
{C, C, C, C, C, N, C, C, H, C,  
H, H, H, H, H, H, N, C, H, H, H, O, O, H}

**Las cargas formales de los átomos:**

*In[°]:= ChemicalData["Ltryptophan", "FormalCharges"]*  
| datos químicos

*Out[°]=*  
{0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0,  
0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0}

**Podemos obtener una lista de propiedades de una sustancia química en particular:**

*In[°]:= ChemicalData["MethylOrange",*  
| datos químicos

**"Properties" // Short**  
| propiedades | corto

*Out[°]//Short=*  
{AcidityConstants, AdjacencyMatrix,  
<<96>>, VertexTypes, Viscosity}

**Podemos obtener una corta descripción de una determinada propiedad:**

*In[°]:= ChemicalData["Benzene",*  
| datos químicos

**"VaporDensity", "Description"]**

*Out[°]=*  
vapor density  
**La definición de la propiedad:**

```
In[6]:= ChemicalData["Benzene",
  datos químicos
  "VaporDensity", "LongDescription"]
```

Out[6]=  
density relative to air density  
**El valor de la propiedad:**

```
In[7]:= ChemicalData["Benzene", "VaporDensity"]
  datos químicos
```

Out[7]=  
2.77

**A veces necesitamos encontrar las unidades en las que se expresa una determinada propiedad:**

```
In[8]:= ChemicalData["Acetone",
  datos químicos
  "BoilingPoint", "Units"]
```

Out[8]=  
DegreesCelsius  
**Expresado como texto:**

```
In[9]:= ChemicalData["Acetone",
  datos químicos
  "BoilingPoint", "UnitsName"]
```

Out[9]=  
degrees Celsius  
**Su notación:**

```
In[10]:= ChemicalData["Acetone",
  datos químicos
  "BoilingPoint", "UnitsNotation"]
```

Out[10]=  
°C  
**Su valor:**

*In[1]:=* **ChemicalData["Acetone", "BoilingPoint"]**  
 [datos químicos]

*Out[1]=*

56. °C

**Podemos representar el punto de ebullición de una sustancia como un intervalo de confianza:**

*In[2]:=* **ChemicalData[**  
 [datos químicos]

**"2,4Dimethylbenzaldehyde", "BoilingPoint"]**

*Out[2]=*

102.5 °C

*In[3]:=* **ChemicalData["2,4Dimethylbenzaldehyde",**  
 [datos químicos]

**"BoilingPoint", "Interval"]**  
 [intervalo]

*Out[3]=*

**Interval[{102, 103}]**

**Un valor de propiedad puede ser cualquier expresión válida de Wolfram Research:**

*In[4]:=* **ChemicalData["LeadChromate", "Density"]**  
 [datos químicos]

*Out[4]=*

6023. kg/m<sup>3</sup>

*In[5]:=* **ChemicalData["HydrochloricAcid", "Phase"]**  
 [datos químicos]

*Out[5]=*

aqueous

```
In[6]:= ChemicalData[  
|datos químicos  
"AluminumPhosphide", "NFPALabel"]
```

Out[6]=



Si una propiedad no se encuentra la respuesta será:

```
In[7]:= ChemicalData["MagnesiumSulfate",  
|datos químicos  
"AcidityConstants"]
```

Out[7]=

Missing[NotAvailable]

## BUSQUEDAS MULTIPLES

**Podemos obtener los valores de una propiedad de una lista de compuestos químicos:**

```
In[1]:= Table[ChemicalData[i, "MeltingPoint"],  
          |tabla |datos químicos  
          {i, ChemicalData["C4H8"]}]  
          |datos químicos
```

```
Out[1]= { -177.16 °C, -90.2 °C, -185. °C,  
          -139. °C, -105. °C, -140. °C, -140. °C }
```

**Podemos hacerlo también, de esta otra manera:**

```
In[2]:= ChemicalData[#, "MeltingPoint"] & /@  
          |datos químicos  
          ChemicalData["C4H8"]  
          |datos químicos
```

```
Out[2]= { -177.16 °C, -90.2 °C, -185. °C,  
          -139. °C, -105. °C, -140. °C, -140. °C }
```

**Obtenga los valores de múltiples propiedades de una lista de compuestos químicos:**

```
In[3]:= vals =  
          Table[ChemicalData[#, prop], {prop, {"Formula",  
          |tabla |datos químicos  
          "MolarMass", "MeltingPoint"}}] & /@  
          ChemicalData[{"Sulfur", "Compound"}];  
          |datos químicos
```

**Los vemos en una tabla:**

```
In[8]:= Text[Grid[Prepend[vals[[1 ;; 10]],  

  texto rejilla añade al principio  

  {"", "molar mass", "melting point"}],  

  Frame → All, Background → {None,  

  marco todo fondo de imagen ninguno  

  {{LightBlue, White}}, {1 → LightYellow}}},  

  azul claro blanco amarillo claro  

  Alignment → Left]  

  alineamiento izquierda
```

Out[8]=

	molar mass	melting point
<sup>32</sup> S	31.972070999 g/mol	120.5 °C
S	32.06 g/mol	112.8 °C
<sup>34</sup> S	33.967866902 g/mol	119. °C
H <sub>2</sub> S	34.08 g/mol	-85. °C
<sup>2</sup> H <sub>2</sub> S	36.09 g/mol	-85. °C
BeS	41.07 g/mol	Missing[NotAvailable]
Li <sub>2</sub> S	45.9 g/mol	Missing[NotAvailable]
CH <sub>3</sub> SH	48.10 g/mol	-123. °C
NH <sub>4</sub> SH	51.11 g/mol	120. °C
NaHS	56.06 g/mol	43. °C

**Use DeleteCases para filtrar los datos que faltan:**

```
In[9]:= Short[DeleteCases[Table[ChemicalData[#, prop],  

  corto elimina casos tabla datos químicos  

  {prop, {"Formula", "BoilingPoint"}]}] & /@  

  ChemicalData["Alkanes"], {_, _Missing}], 4]  

  datos químicos ausente
```

Out[9]//Short=

```
{ {CH4, -161.482 °C}, {CH4, -161.48 °C}, {13CH4, -161. °C},  

{C3H32H, -161. °C}, <<415>>, {C37H76, 504. °C},  

{C38H78, 588. °C}, {C2H3 (C2H2)34 C2H3, 265. °C} }
```

**Alternativamente, use Cases con Except para filtrar los datos:**

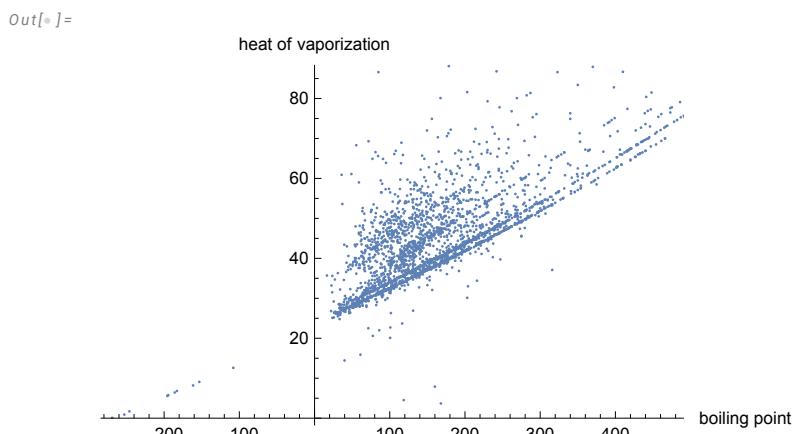
```
In[=]:= Short[Cases[Table[ChemicalData[#, prop], 
  {corto  |casos  |tabla  |datos químicos
   prop, {"Formula", "BoilingPoint"}]}] & /@ 
  ChemicalData["Alkanes"], 
  |datos químicos
 Except[{_, _Missing}]], 4]
 |excepto  |ausente

Out[=]//Short=
{{CH4, -161.482 °C}, {CH4, -161.48 °C}, {13CH4, -161. °C},
 {CH32H, -161. °C}, <<415>>, {C37H76, 504. °C},
 {C38H78, 588. °C}, {C2H3(C2H2)34C2H3, 265. °C}}
```

**Usamos ListPlot para representar una lista de valores:**

```
In[=]:= data = Table[{ChemicalData[chem, "BoilingPoint"], 
  |tabla  |datos químicos
  ChemicalData[chem, "VaporizationHeat"]}, 
  |datos químicos
 {chem, ChemicalData["Liquid"]}];
 |datos químicos

In[=]:= ListPlot[data, AxesLabel → 
  |representación de li·|etiqueta de ejes
  {"boiling point", "heat of vaporization"}]
```



**Los datos que faltan se excluyen automáticamente en las funciones de trazado:**

```
In[8]:= Cases[data, {_ , _Missing}] // Length
casos ausente longitud
```

Out[8]=

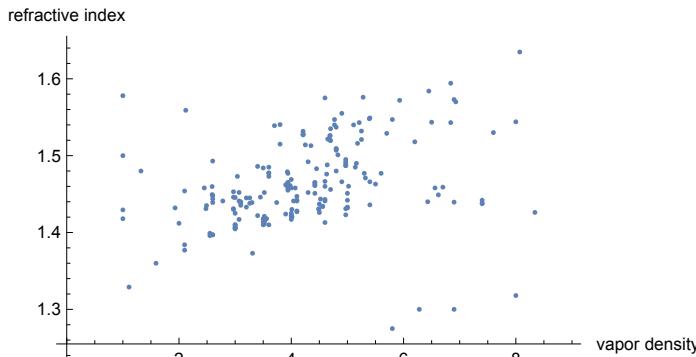
7957

## Utilice información sobre herramientas para etiquetar puntos de datos individuales:

```
In[9]:= data = Table[
tabla
Tooltip[{ChemicalData[chem, "VaporDensity"] ,
sugerencia datos químicos
ChemicalData[chem, "RefractiveIndex"]},
datos químicos
ChemicalData[chem, "HillFormula"]],
datos químicos
{chem, ChemicalData["Alcohols"]}];
datos químicos
```

```
In[10]:= ListPlot[data, AxesLabel →
representación de los ejes
{"vapor density", "refractive index"}]
```

Out[10]=



## Utilice ElementData para obtener propiedades adicionales de los elementos químicos:

```
In[11]:= ElementData["Properties"]
datos de elementos propiedades
```

Out[11]=

```
{ "adiabatic index" , "allotropes" , "allotropic multiplicities" , "alternate names" ,
"atomic mass" , "atomic number" , "atomic radius" , "atomic symbol" ,
```

block , boiling point  $T_b$  , Brinell hardness , bulk modulus ,  
CAS number , color , common compound names , covalent radius ,  
critical pressure  $p_c$  , critical temperature  $T_c$  , crust abundance ,  
crust molar abundance , Bravais lattice , lattice schematic ,  
Curie point , Debye characteristic temperature , decay mode ,  
discoverers , discovery country , discovery date , electrical conductivity ,  
electrical type , electron affinity , electron count , electronegativity ,  
electronic configuration , electron shell configuration , entity classes ,  
entity type list , molar heat of fusion  $\Delta_{\text{fus}}H$  , gas atomic multiplicities ,  
group , half-life , human abundance , human molar abundance ,  
icon color , image , ionization energies , isotope abundances ,  
isotope half-lives , isotope lifetimes , known isotopes ,  
known oxidation states , lattice angles , lattice constants ,  
Lewis structure , liquid density , magnetic type , mass density ,  
mass magnetic susceptibility , melting point  $T_m$  , memberships ,  
meteorite abundance , meteorite molar abundance , Mohs hardness ,  
molar heat capacity , molar magnetic susceptibility , molar mass ,  
molar radioactivity , molar volume , most common oxidation states ,  
name , Néel point , number of neutrons per isotope ,  
neutron cross-section , neutron mass absorption , nuclear diameter ,  
nuclear radius , ocean abundance , ocean molar abundance ,  
orbital occupation list , origins , period , phase at STP , Poisson ratio ,  
price , proton count , refractive index , resistivity , series ,  
shear modulus , short electronic configuration , solar abundance ,  
solar molar abundance , molar heat of solidification , sound speed ,

space group , IUCr space group number , specific heat of fusion  $\Delta_{\text{fus}}h$  ,  
 specific heat capacity  $c_p$  , specific ionization energies , specific radioactivity ,  
 specific heat of solidification , stable isotopes , superconducting point ,  
 tensile yield strength , term symbol , thermal conductivity ,  
 thermal expansion , threshold frequency , ultimate tensile strength ,  
 universe abundance , universe molar abundance , unstable isotopes ,  
 valence , number of valence electrons , van der Waals radius ,  
 molar heat of vaporization  $\Delta_{\text{vap}}H$  , Vickers hardness ,  
 volume magnetic susceptibility , work function , Young modulus } ,

In[ ]:= ElementData["Carbon", "HumanAbundance"]  
 |datos de elementos químicos

Out[ ]=

23. mass%

In[ ]:= ElementData["Oxygen", "QuantumNumbers"]  
 |datos de elementos químicos

Out[ ]=

 $^3P_2$ 

**Use IsotopeData para buscar información detallada acerca de los isótopos nucleares:**

In[1]:= **IsotopeData["Properties"]**  
[datos de isótopos |propiedades]

Out[1]=

{AtomicMass, AtomicNumber, BindingEnergy,  
BranchingRatios, DaughterNuclides, DecayEnergies,  
DecayModes, DecayModeSymbols, DecayProducts,  
ExcitedStateEnergies, ExcitedStateHalfLives,  
ExcitedStateLifetimes, ExcitedStateParities,  
ExcitedStateSpins, ExcitedStateWidths, FullSymbol,  
HalfLife, IsotopeAbundance, Lifetime, MagneticMoment,  
MassExcess, MassNumber, Memberships, Name, NeutronNumber,  
Parity, QuadrupoleMoment, QuantumStatistics,  
Spin, Stable, StandardName, Symbol, Width}

In[2]:= **IsotopeData["Deuterium", "IsotopeAbundance"]**  
[datos de isótopos]

Out[2]=

0.0001500

In[3]:= **IsotopeData["Carbon14", "HalfLife"]**  
[datos de isótopos]

Out[3]=

$1.8 \times 10^{11}$  s