Cơ chế để giải bài này giống với kiểu ngăn xếp - stack, vào sau ra trước. Đầu tiên ta sẽ đọc toàn bộ xâu: s, sau đó xét lần lượt các ký tự trong xâu: s[i], có các trường hợp sau:

* Nếu s[i] = ‘(‘ thì ta đưa vào stack giá trị 0.
* Nếu s[i] ϵ [‘2’,’9’] thì lấy giá trị ở cuối stack ra nhân với giá trị tương ứng s[i] - ‘0’, rồi lấy kết quả đưa vào stack.
* Nếu s[i] ϵ {‘C’, ‘O’, ‘H’] thì đưa vào stack trọng lươngj của nguyên tố đó.
* Nếu s[i] = ‘)’ thì ta lấy lần lượt các giá trị ở cuối stack ra đổng thời tính tổng của các giá trị này cho đến khi lấy ra giá trị 0, rồi lại đưa vào stack tổng vừa tìm được.

Duyệt xong ta sẽ tính tổng các giá trị còn lại trong stack => khối lượng của hóa chất.   
Minh họa với ví dụ số 2 ở trên :

