

BUSCAR UNA SUBESTRUCTURA MOLECULAR DENTRO DE UNA MOLECULA

BUSCAR UNA SUBESTRUCTURA EN UNA MOLÉCULA

Definimos una molécula a partir de sus átomos y enlaces:

```

In[*]:= Molecule[{"C", "C", "C", "C", "C", "C",
  |molécula      |con··· |con··· |con··· |con··· |con··· |constante
  "C", "C", "C", "C", "C", "C", "C", "C",
  |con··· |con··· |con··· |con··· |con··· |con··· |con··· |constante
  "C", "C", "C", "C", "C", "C", "C", "C"},
  |con··· |con··· |con··· |con··· |con··· |con··· |con··· |constante
  {Bond[{1, 2}, "Single"], Bond[{2, 3}, "Single"],
  |enlace                               |enlace
  Bond[{3, 4}, "Single"], Bond[{4, 5}, "Aromatic"],
  |enlace                               |enlace
  Bond[{5, 6}, "Aromatic"], Bond[{6, 7},
  |enlace                               |enlace
  "Aromatic"], Bond[{7, 8}, "Aromatic"],
  |enlace
  Bond[{8, 9}, "Aromatic"], Bond[{8, 10},
  |enlace                               |enlace
  "Single"], Bond[{10, 11}, "Single"],
  |enlace
  Bond[{11, 12}, "Single"], Bond[{12, 13},
  |enlace                               |enlace
  "Single"], Bond[{13, 14}, "Single"],
  |enlace
  Bond[{14, 15}, "Single"], Bond[{15, 16},
  |enlace                               |enlace
  "Aromatic"], Bond[{16, 17}, "Aromatic"],
  |enlace
  Bond[{17, 18}, "Aromatic"], Bond[{18, 19},
  |enlace                               |enlace
  "Aromatic"], Bond[{19, 20}, "Aromatic"],
  |enlace
  Bond[{14, 21}, "Single"], Bond[{21, 22},
  |enlace                               |enlace
  "Single"], Bond[{9, 4}, "Aromatic"],
  |enlace
  Bond[{20, 15}, "Aromatic"]}], {}],
  MoleculePattern["c1cccc1"]
  |patrón de molécula

```

Su estructura en 2D es:

```

In[*]:= MoleculePlot[
  |representación de molécula

```

↳ representación de molécula

```

Molecule[{"C", "C", "C", "C", "C", "C",
  [molécula      [con... [con... [con... [con... [con... [constante
    "C", "C", "C", "C", "C", "C", "C", "C",
      [con... [con... [con... [con... [con... [con... [con... [constante
    "C", "C", "C", "C", "C", "C", "C", "C"}],
      [con... [con... [con... [con... [con... [con... [con... [constante
{Bond[{1, 2}, "Single"], Bond[{2, 3}, "Single"],
  [enlace                [enlace
    Bond[{3, 4}, "Single"], Bond[{4, 5},
  [enlace                [enlace
      "Aromatic"], Bond[{5, 6}, "Aromatic"],
        [enlace
    Bond[{6, 7}, "Aromatic"], Bond[{7, 8},
  [enlace                [enlace
      "Aromatic"], Bond[{8, 9}, "Aromatic"],
        [enlace
    Bond[{8, 10}, "Single"], Bond[{10, 11},
  [enlace                [enlace
      "Single"], Bond[{11, 12}, "Single"],
        [enlace
    Bond[{12, 13}, "Single"], Bond[{13, 14},
  [enlace                [enlace
      "Single"], Bond[{14, 15}, "Single"],
        [enlace
    Bond[{15, 16}, "Aromatic"],
  [enlace
    Bond[{16, 17}, "Aromatic"],
  [enlace
    Bond[{17, 18}, "Aromatic"], Bond[{18, 19},
  [enlace                [enlace
      "Aromatic"], Bond[{19, 20}, "Aromatic"],
        [enlace
    Bond[{14, 21}, "Single"], Bond[{21, 22},
  [enlace                [enlace
      "Single"], Bond[{9, 4}, "Aromatic"],
        [enlace
    Bond[{20, 15}, "Aromatic"]}], {}],
  [enlace
MoleculePattern["c1ccccc1"],
  [patrón de molécula

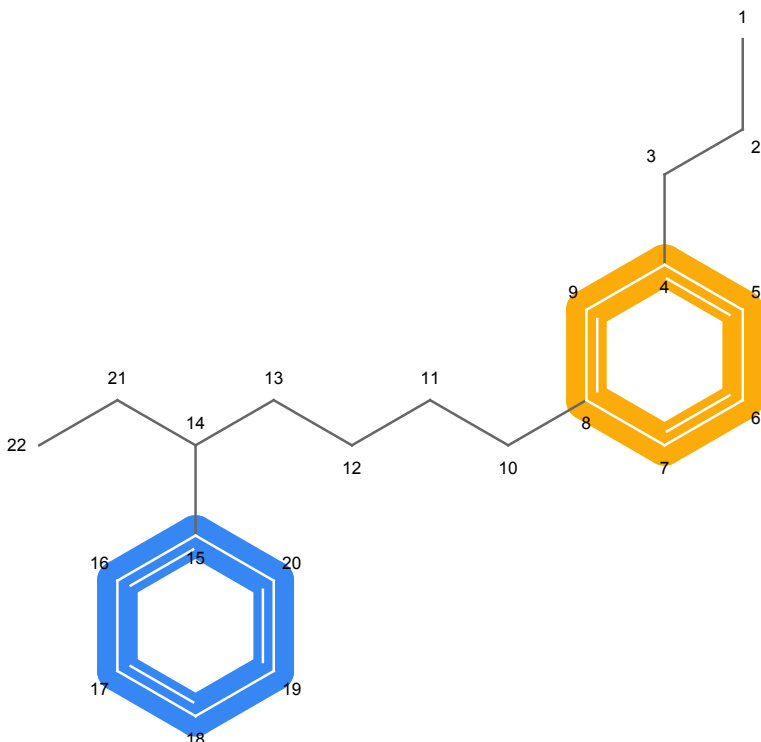
```

patron de molecula

AtomLabels → "AtomIndex"]

etiquetas de átomos

Out[*]=



Podemos encontrar los anillos “fenilo” que lleva la molecula:

```

In[*]:= FindMoleculeSubstructure[
  encuentra subestructura molecular
  Molecule[{"C", "C", "C", "C", "C", "C",
  molécula      [con... [con... [con... [con... [con... [constante
    "C", "C", "C", "C", "C", "C", "C", "C",
    [con... [con... [con... [con... [con... [con... [con... [constante
    "C", "C", "C", "C", "C", "C", "C", "C"},
    [con... [con... [con... [con... [con... [con... [con... [constante
  {Bond[{1, 2}, "Single"], Bond[{2, 3}, "Single"],
  enlace          enlace
  Bond[{3, 4}, "Single"], Bond[{4, 5},
  enlace          enlace
    "Aromatic"], Bond[{5, 6}, "Aromatic"],
    enlace
  Bond[{6, 7}, "Aromatic"], Bond[{7, 8},
  enlace          enlace
    "Aromatic"], Bond[{8, 9}, "Aromatic"],
    enlace
  ]

```

```

Bond[{8, 10}, "Single"], Bond[{10, 11},
  "Single"], Bond[{11, 12}, "Single"],
Bond[{12, 13}, "Single"], Bond[{13, 14},
  "Single"], Bond[{14, 15}, "Single"],
Bond[{15, 16}, "Aromatic"],
Bond[{16, 17}, "Aromatic"],
Bond[{17, 18}, "Aromatic"], Bond[{18, 19},
  "Aromatic"], Bond[{19, 20}, "Aromatic"],
Bond[{14, 21}, "Single"], Bond[{21, 22},
  "Single"], Bond[{9, 4}, "Aromatic"],
Bond[{20, 15}, "Aromatic"]}, {}],
MoleculePattern["c1cccc1"]

```

Out[]=

```
{<| 1 → 4, 2 → 5, 3 → 6, 4 → 7, 5 → 8, 6 → 9 |>}
```

Representamos una nueva molécula en la que deseamos visualizar los grupos alcohol:

```

In[ ]:= MoleculePlot[
  Molecule[{"C", "C", "C", "C", "C", "C", "C",
    "C", "C", "C", "C", "O", "C", "C", "C",
    "C", "C", "C", "C", "O", "C", "C", "C", "O",
    "H", "H", "H", "H", "H", "H", "H", "H", "H",
    "H", "H", "H", "H", "H", "H", "H", "H", "H",

```

```

    "H", "H", "H", "H", "H", "H", "H", "H"},
  {Bond[{1, 2}, "Single"], Bond[{2, 3}, "Single"],
    enlace enlace
  Bond[{3, 4}, "Single"], Bond[{4, 5}, "Single"],
    enlace enlace
  Bond[{5, 6}, "Aromatic"],
    enlace
  Bond[{6, 7}, "Aromatic"], Bond[{7, 8},
    enlace enlace
    "Aromatic"], Bond[{8, 9}, "Aromatic"],
      enlace
  Bond[{9, 10}, "Aromatic"], Bond[{10, 11},
    enlace enlace
    "Aromatic"], Bond[{11, 12}, "Single"],
      enlace
  Bond[{11, 13}, "Aromatic"], Bond[{13, 14},
    enlace enlace
    "Aromatic"], Bond[{14, 15}, "Aromatic"],
      enlace
  Bond[{6, 16}, "Single"], Bond[{16, 17},
    enlace enlace
    "Single"], Bond[{17, 18}, "Single"],
      enlace
  Bond[{18, 19}, "Single"], Bond[{19, 20},
    enlace enlace
    "Single"], Bond[{19, 21}, "Single"],
      enlace
  Bond[{21, 22}, "Single"], Bond[{22, 23},
    enlace enlace
    "Single"], Bond[{23, 24}, "Single"],
      enlace
  Bond[{16, 2}, "Single"], Bond[{19, 2},
    enlace enlace
    "Single"], Bond[{15, 5}, "Aromatic"],
      enlace
  Bond[{15, 9}, "Aromatic"], Bond[{1, 25},
    enlace enlace
    "Single"], Bond[{1, 26}, "Single"],
      enlace
  Bond[{1, 27}, "Single"], Bond[{3, 28},
    enlace enlace

```

```

    "Single"], Bond[{3, 29}, "Single"],
    Bond[{4, 30}, "Single"], Bond[{4, 31},
    "Single"], Bond[{7, 32}, "Single"],
    Bond[{8, 33}, "Single"], Bond[{10, 34},
    "Single"], Bond[{12, 35}, "Single"],
    Bond[{13, 36}, "Single"], Bond[{14, 37},
    "Single"], Bond[{16, 38}, "Single"],
    Bond[{17, 39}, "Single"], Bond[{17, 40},
    "Single"], Bond[{18, 41}, "Single"],
    Bond[{18, 42}, "Single"], Bond[{20, 43},
    "Single"], Bond[{21, 44}, "Single"],
    Bond[{21, 45}, "Single"], Bond[{22, 46},
    "Single"], Bond[{22, 47}, "Single"],
    Bond[{23, 48}, "Single"], Bond[{23, 49},
    "Single"], Bond[{24, 50}, "Single"]},
{StereochemistryElements → {<|"StereoType" →
    "Tetrahedral", "ChiralCenter" → 2,
    "Direction" → "Counterclockwise">, <|
    "StereoType" → "Tetrahedral",
    "ChiralCenter" → 16, "Direction" →
    "Counterclockwise">, <|"StereoType" →

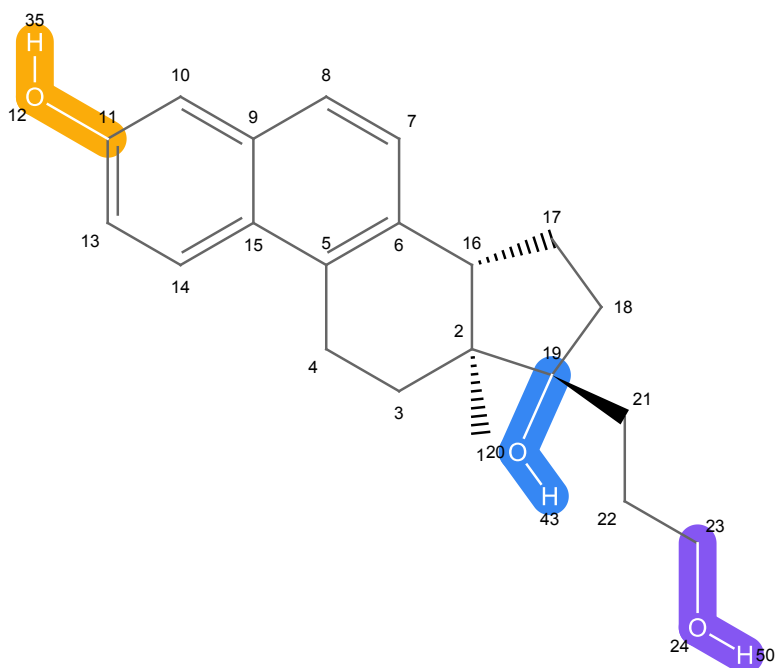
```

```
"Tetrahedral", "ChiralCenter" → 19,
"Direction" → "Clockwise" |>}}],
  |dirección
```

```
MoleculePattern[{"C", "O", "H"},
  |patrón de molécula |con... |notación O
  {Bond[{1, 2}], Bond[{2, 3}]}],
  |enlace |enlace
```

```
AtomLabels → "AtomIndex"]
  |etiquetas de átomos
```

Out[]=



Podemos pedir que encuentre todos los grupos funcionales del alcohol:

```
In[ ]:= FindMoleculeSubstructure[
  |encuentra subestructura molecular
  Molecule[{"C", "C", "C", "C", "C", "C", "C",
  |molécula |con... |con... |con... |con... |con... |con... |constante
  "C", "C", "C", "C", "O", "C", "C", "C",
  |con... |con... |con... |con... |nota... |con... |con... |constante
  "C", "C", "C", "C", "O", "C", "C", "C", "O",
  |con... |con... |con... |con... |nota... |con... |con... |con... |notación O
  "H", "H", "H", "H", "H", "H", "H", "H", "H",
  "H", "H", "H", "H", "H", "H", "H", "H", "H",
  "H", "H", "H", "H", "H", "H", "H", "H"}],
```



```

{Bond[{1, 2}, "Single"], Bond[{2, 3}, "Single"],
  enlace
  enlace
  Bond[{3, 4}, "Single"], Bond[{4, 5}, "Single"],
  enlace
  enlace
  Bond[{5, 6}, "Aromatic"],
  enlace
  Bond[{6, 7}, "Aromatic"], Bond[{7, 8},
  enlace
  enlace
  "Aromatic"], Bond[{8, 9}, "Aromatic"],
  enlace
  Bond[{9, 10}, "Aromatic"], Bond[{10, 11},
  enlace
  enlace
  "Aromatic"], Bond[{11, 12}, "Single"],
  enlace
  Bond[{11, 13}, "Aromatic"], Bond[{13, 14},
  enlace
  enlace
  "Aromatic"], Bond[{14, 15}, "Aromatic"],
  enlace
  Bond[{6, 16}, "Single"], Bond[{16, 17},
  enlace
  enlace
  "Single"], Bond[{17, 18}, "Single"],
  enlace
  Bond[{18, 19}, "Single"], Bond[{19, 20},
  enlace
  enlace
  "Single"], Bond[{19, 21}, "Single"],
  enlace
  Bond[{21, 22}, "Single"], Bond[{22, 23},
  enlace
  enlace
  "Single"], Bond[{23, 24}, "Single"],
  enlace
  Bond[{16, 2}, "Single"], Bond[{19, 2},
  enlace
  enlace
  "Single"], Bond[{15, 5}, "Aromatic"],
  enlace
  Bond[{15, 9}, "Aromatic"], Bond[{1, 25},
  enlace
  enlace
  "Single"], Bond[{1, 26}, "Single"],
  enlace
  Bond[{1, 27}, "Single"], Bond[{3, 28},
  enlace
  enlace

```

```

    "Single"], Bond[{3, 29}, "Single"],
    Bond[{4, 30}, "Single"], Bond[{4, 31},
    "Single"], Bond[{7, 32}, "Single"],
    Bond[{8, 33}, "Single"], Bond[{10, 34},
    "Single"], Bond[{12, 35}, "Single"],
    Bond[{13, 36}, "Single"], Bond[{14, 37},
    "Single"], Bond[{16, 38}, "Single"],
    Bond[{17, 39}, "Single"], Bond[{17, 40},
    "Single"], Bond[{18, 41}, "Single"],
    Bond[{18, 42}, "Single"], Bond[{20, 43},
    "Single"], Bond[{21, 44}, "Single"],
    Bond[{21, 45}, "Single"], Bond[{22, 46},
    "Single"], Bond[{22, 47}, "Single"],
    Bond[{23, 48}, "Single"], Bond[{23, 49},
    "Single"], Bond[{24, 50}, "Single"]},
{StereochemistryElements → {<|"StereoType" →
  "Tetrahedral", "ChiralCenter" → 2,
  "Direction" → "Counterclockwise">, <|
  "StereoType" → "Tetrahedral",
  "ChiralCenter" → 16, "Direction" →
  "Counterclockwise">, <|"StereoType" →

```

```

    "Tetrahedral", "ChiralCenter" → 19,
    "Direction" → "Clockwise" |> }],
    [dirección
MoleculePattern[{"C", "O", "H"},
    [patrón de molécula [con... [notación O
    {Bond[{1, 2}], Bond[{2, 3}]}], All]
    [enlace [enlace [todo

```

```

Out[ ]= { <| 1 → 11, 2 → 12, 3 → 35 |>,
    <| 1 → 19, 2 → 20, 3 → 43 |>,
    <| 1 → 23, 2 → 24, 3 → 50 |> }

```

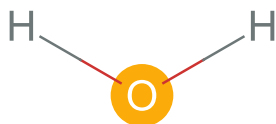
Podemos usar un símbolo atómico de cadena como patrón de búsqueda:

```

In[ ]:= MoleculePlot[
    [representación de molécula
    Molecule[{"O", "H", "H"}, {Bond[{1, 2}, "Single"],
    [molécula [notación O [enlace
    Bond[{1, 3}, "Single"]}, {}], "O"]
    [enlace [notación O

```

Out[]=



```

In[ ]:= FindMoleculeSubstructure[
    [encuentra subestructura molecular
    Molecule[{"O", "H", "H"}, {Bond[{1, 2}, "Single"],
    [molécula [notación O [enlace
    Bond[{1, 3}, "Single"]}, {}], "O"]
    [enlace [notación O

```

Out[]=

```

{ <| 1 → 1 |> }

```

```
In[*]:= FindMoleculeSubstructure[
  encuentra subestructura molecular
  Molecule[{"O", "H", "H"}, {Bond[{1, 2}, "Single"],
  molécula notación O enlace
  Bond[{1, 3}, "Single"]}, {}, "H", All]
  enlace todo
```

Out[*]=

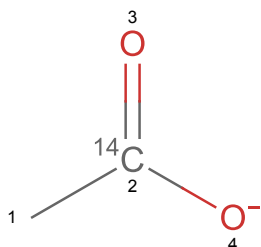
```
{<| 1 → 2 |>, <| 1 → 3 |>}
```

Podemos preguntar por la carga o masa del elemento cuyo símbolo atómico nos interese:

```
In[*]:= m = Molecule[
  molécula
  {Atom["C"], Atom["C", "MassNumber" → 14],
  átomo con... átomo constante
  Atom["O"], Atom["O", "FormalCharge" → -1],
  átomo nota... átomo notación O
  Atom["H"], Atom["H"], Atom["H"]},
  átomo átomo átomo
  {Bond[{1, 2}, "Single"], Bond[{2, 3}, "Double"],
  enlace enlace
  Bond[{2, 4}, "Single"],
  enlace
  Bond[{1, 5}, "Single"], Bond[{1, 6}, "Single"],
  enlace enlace
  Bond[{1, 7}, "Single"]}}];
  enlace
```

```
In[*]:= MoleculePlot[m, AtomLabels → "AtomIndex"]
representación de m... etiquetas de átomos
```

Out[*]=



```
In[*]:= FindMoleculeSubstructure[
  encuentra subestructura molecular
  m, Atom["O", "FormalCharge" → -1]]
  [átomo [notación O]
```

Out[*]=

```
{ <| 1 → 4 |> }
```

```
In[*]:= FindMoleculeSubstructure[
  encuentra subestructura molecular
  m, Atom["C", "MassNumber" → 14]]
  [átomo [constante]
```

Out[*]=

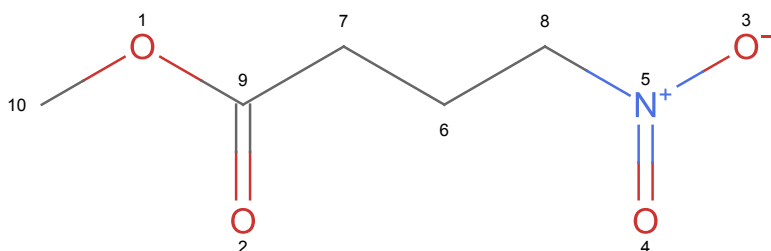
```
{ <| 1 → 2 |> }
```

Definimos una molécula:

```
In[*]:= n = Molecule[
  molécula
  Entity["Chemical", "Methyl4Nitrobutyrate"]];
  [entidad]
```

```
In[*]:= MoleculePlot[n, AtomLabels → "AtomIndex"]
  [representación de m·· [etiquetas de átomos]
```

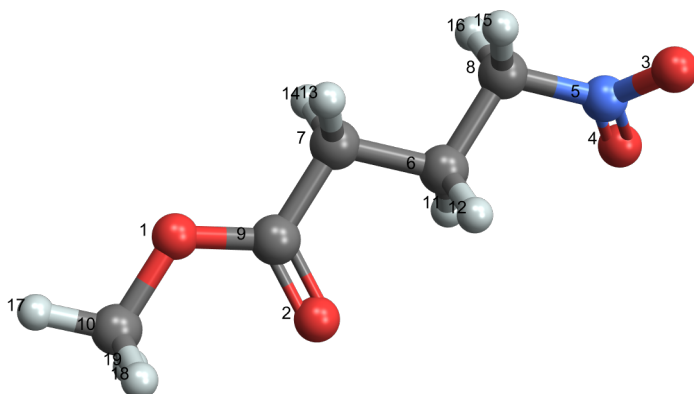
Out[*]=



En tres dimensiones:

```
In[*]:= MoleculePlot3D[n, AtomLabels → "AtomIndex"]
         [representación 3D de m... [etiquetas de átomos
```

Out[*]=



```
In[*]:= FindMoleculeSubstructure[n,
         [encuentra subestructura molecular
         Atom["FormalCharge" → Except[0]], All]
         [átomo [excepto [todo
```

Out[*]=

```
{ <| 1 → 3 |>, <| 1 → 5 |> }
```

Podemos encontrar los átomos cargados positivamente:

```
In[*]:= FindMoleculeSubstructure[n,
         [encuentra subestructura molecular
         Atom["FormalCharge" → GreaterThan[0]], All]
         [átomo [mayor que [todo
```

Out[*]=

```
{ <| 1 → 5 |> }
```

Los átomos cargados negativamente:

```
In[*]:= FindMoleculeSubstructure[n,
         [encuentra subestructura molecular
         Atom["FormalCharge" → LessEqualThan[-1]], All]
         [átomo [menor o igual que [todo
```

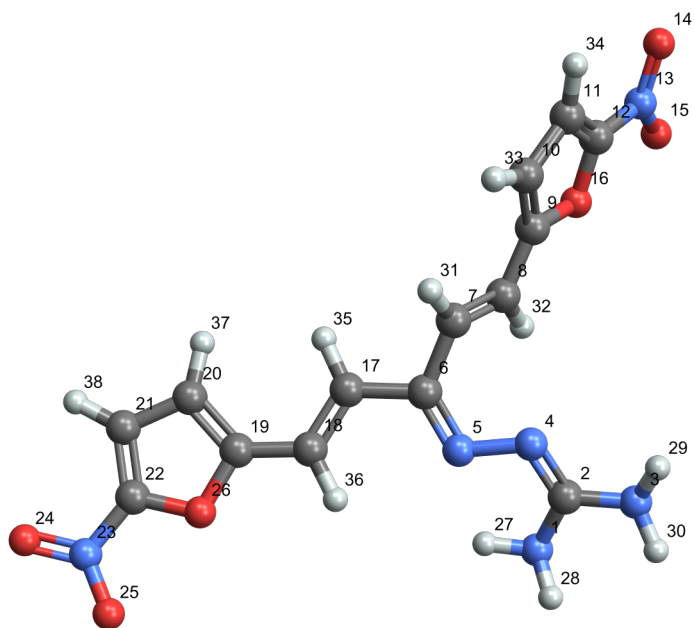
```
Out[*]= { <| 1 → 3 |> }
```

Utilice Bond para definir un patrón para cualquier doble enlace:

```
In[*]:= o = Molecule[
  molécula
  "2-[[ (1E,4E)-1,5-bis(5-nitrofurán-2-yl) penta-1
    número e
    ,4-dien-3-ylidene] amino] guanidine"];
```

```
In[*]:= MoleculePlot3D[o, AtomLabels -> "AtomIndex"]
  representación 3D de m... etiquetas de átomos
```

Out[*]=



```
In[*]:= FindMoleculeSubstructure[
  encuentra subestructura molecular
  o, Bond[_ , "Double"], All]
  enlace todo
```

Out[*]=

```
{ <1 -> 2, 2 -> 4 |> , <1 -> 5, 2 -> 6 |> , <1 -> 7, 2 -> 8 |> ,
  <1 -> 13, 2 -> 14 |> , <1 -> 17, 2 -> 18 |> , <1 -> 23, 2 -> 24 |> }
```

Solo dobles enlaces con un átomo de nitrógeno:

```

In[*]:= FindMoleculeSubstructure[
  encuentra subestructura molecular
  o, Bond[{"N", _}, "Double"], All]
  enlace valor numérico todo

Out[*]:= {<| 1 → 4, 2 → 2 |>, <| 1 → 5, 2 → 6 |>,
  <| 1 → 13, 2 → 14 |>, <| 1 → 23, 2 → 24 |>}

```

Encontrar dobles enlaces con un átomo cargado:

```

In[*]:= FindMoleculeSubstructure[o,
  encuentra subestructura molecular
  Bond[{Atom["FormalCharge" → Except[0]], _},
  enlace átomo excepto
  "Double"], All]
  todo

```

```

Out[*]=
{<| 1 → 13, 2 → 14 |>, <| 1 → 23, 2 → 24 |>}

```

Por defecto los estereoisómeros no coinciden:

```

In[*]:= FindMoleculeSubstructure[Molecule["l-alanine"],
  encuentra subestructura molecular molécula
  MoleculePattern["C[C@@H](N)C(=O)O"]
  patrón de molécula [const] [c] [notación O]

```

```

Out[*]=
{}

```

Use IgnoreStereochemistry -> True, para coincidencia positiva:

```

In[*]:= FindMoleculeSubstructure[Molecule["l-alanine"],
  encuentra subestructura molecular molécula
  MoleculePattern["C[C@@H](N)C(=O)O"],
  patrón de molécula [const] [c] [notación O]
  IgnoreStereochemistry → True]
  ignora estereoquímica verdadero

```

```

Out[*]=
{<| 1 → 1, 2 → 2, 3 → 3, 4 → 4, 5 → 5, 6 → 6 |>}

```

De forma predeterminada, la coincidencia de subestructuras se realiza utilizando el gráfico de supresión de hidrógenos de una molécula, a menos que el patrón contenga átomos de hidrógeno específicos:


```

In[*]:= FindMoleculeSubstructure[
  encuentra subestructura molecular
  Molecule[{"C", "C", "C", "Cl"},
  molécula con··· con··· constante
  {Bond[{1, 2}, "Single"], Bond[{2, 3}, "Single"],
  enlace enlace
  Bond[{2, 4}, "Single"]}, {}],
  Bond[{"C", "H"}, "Single"], All]
  enlace constante todo

```

Out[*]=

```

{<| 1 → 1, 2 → 5 |>, <| 1 → 1, 2 → 6 |>,
 <| 1 → 1, 2 → 7 |>, <| 1 → 2, 2 → 8 |>, <| 1 → 3, 2 → 9 |>,
 <| 1 → 3, 2 → 10 |>, <| 1 → 3, 2 → 11 |>}

```

Se perderán algunas coincidencias con el hidrógeno debido a patrones más complicados. En el siguiente ejemplo, el patrón es para un átomo de carbono unido a un átomo cloro, pero solo se encuentra el enlace C - Cl:

```

In[*]:= FindMoleculeSubstructure[
  encuentra subestructura molecular
  Molecule[{"C", "C", "C", "Cl"},
  molécula con··· con··· constante
  {Bond[{1, 2}, "Single"], Bond[{2, 3}, "Single"],
  enlace enlace
  Bond[{2, 4}, "Single"]}, {}],
  Bond[{"C", Atom["AtomicNumber" → (1 | 17)]},
  enlace co··· átomo número atómico
  "Single"], All]
  todo

```

Out[*]=

```

{<| 1 → 2, 2 → 4 |>}

```

Utilice la opción IncludeHydrogens -> True, para asegurarse de que los hidrógenos se tratan de forma explícita a los efectos de la coincidencia de patrones:

```

In[*]:= FindMoleculeSubstructure[
  encuentra subestructura molecular
  Molecule[{"C", "C", "C", "Cl"},
  molécula      [con... [con... [constante
  {Bond[{1, 2}, "Single"], Bond[{2, 3}, "Single"],
  enlace        enlace
  Bond[{2, 4}, "Single"]}], {}],
  Bond[{"C", Atom["AtomicNumber" → (1 | 17)]},
  enlace [co... [átomo [número atómico
  "Single"], All, IncludeHydrogens → True]
  todo [incluye hidrógenos [verdadero

```

Out[*]=

```

{<| 1 → 1, 2 → 5 |>, <| 1 → 1, 2 → 6 |>,
 <| 1 → 1, 2 → 7 |>, <| 1 → 2, 2 → 4 |>, <| 1 → 2, 2 → 8 |>,
 <| 1 → 3, 2 → 9 |>, <| 1 → 3, 2 → 10 |>, <| 1 → 3, 2 → 11 |>}

```

De forma predeterminada, las coincidencias de subestructuras se eliminan para eliminar múltiples coincidencias con el mismo conjunto de átomos:

```

In[*]:= FindMoleculeSubstructure[Molecule["hexane"],
  encuentra subestructura molecular [molécula
  MoleculePattern["CCCCC"], All]
  patrón de molécula [todo

```

Out[*]=

```

{<| 1 → 1, 2 → 2, 3 → 3, 4 → 4, 5 → 5 |>,
 <| 1 → 2, 2 → 3, 3 → 4, 4 → 5, 5 → 6 |>}

```

Utilice la opción `Overlaps -> True`, para encontrar todas las coincidencias posibles entre el patrón y la molécula:

```
In[*]:= FindMoleculeSubstructure[Molecule["hexane"],
  encuentra subestructura molecular molécula
  MoleculePattern["CCCC"], All, Overlaps → True]
  patrón de molécula [todo [superpone [verdade
```

Out[*]=

```
{<|1 → 1, 2 → 2, 3 → 3, 4 → 4, 5 → 5|>,
 <|1 → 2, 2 → 3, 3 → 4, 4 → 5, 5 → 6|>,
 <|1 → 5, 2 → 4, 3 → 3, 4 → 2, 5 → 1|>,
 <|1 → 6, 2 → 5, 3 → 4, 4 → 3, 5 → 2|>}
```

Escriba una función para localizar el nitrógeno y el carbono del carbonilo en el extremo de un proteína:

```
In[*]:= nterminus[mol_] :=
  Module[{patt, atomsOfInterest = {1, 3}},
  módulo
  patt = MoleculePattern[
    patrón de molécula
    {Atom["N", "HydrogenCount" → 2], Atom["C",
    átomo [valor numérico] [átomo [constante
    "OrbitalHybridization" → "SP3"], Atom["C"],
    átomo [conste
    Atom["O"], Atom[Alternatives["O", "N"]]},
    átomo [nota· [átomo [alternativas] [nota· [valor numéric
    {Bond[{1, 2}, "Single"], Bond[{2, 3},
    enlace [enlace
    "Single"], Bond[{3, 4}, "Double"],
    enlace
    Bond[{3, 5}, "Single"]}}];
  enlace
  DeleteMissing[
  elimina ausentes
  AssociationThread[{"amine", "carbonyl"},
  desarrolla asociación
  Lookup[First[FindMoleculeSubstructure[
  búsqueda[primero [encuentra subestructura molecular
  mol, patt], {}], atomsOfInterest]]]]
```

Aplicar la función a un péptido:

```
In[*]:= peptide = BioSequence["Peptide", "VGSA"];
           [secuencia biomolecular]
           nterminus[peptide]
```

Out[*]=

<| amine → 1, carbonyl → 3 |>

Si lo representamos:

```
In[*]:= peptide = BioSequence["Peptide", "VGSA"];
           [secuencia biomolecular]
           nterminus[peptide];
           MoleculePlot[peptide, %]
           [representación de molécula]
```

Out[*]=

