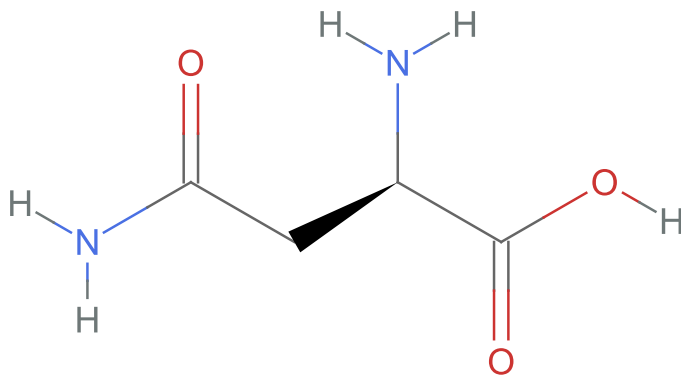


REPRESENTACIÓN DE LAS MOLÉCULAS EN 2D

Molecule Plot

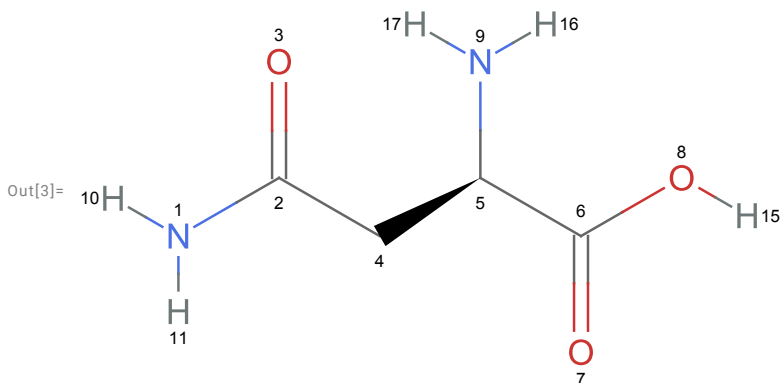
Podemos crear una molécula y representarla gráficamente:

```
In[*]:= MoleculePlot[Molecule["NC(=O)C[C@H](C(=O)O)N"],  
[representación·· [molécula [·· [con·· [·· [·· [valor  
Out[*]=
```



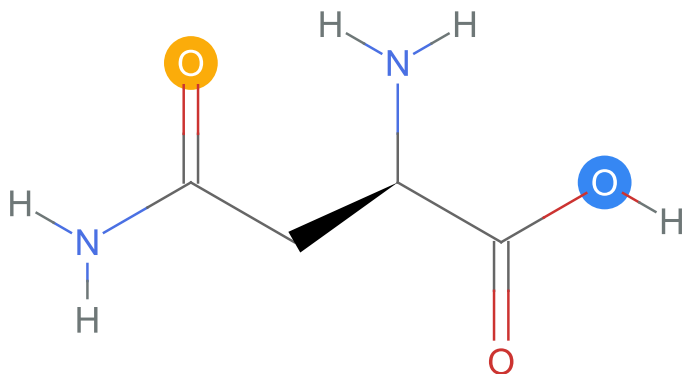
Numeramos los átomos:

```
In[3]:= MoleculePlot[Molecule["NC(=O)C[C@H](C(=O)O)N"], AtomLabels -> "AtomIndex"]  
[representación d·· [molécula [·· [con·· [c·· [·· [·· [valo·· [etiquetas de átomos
```



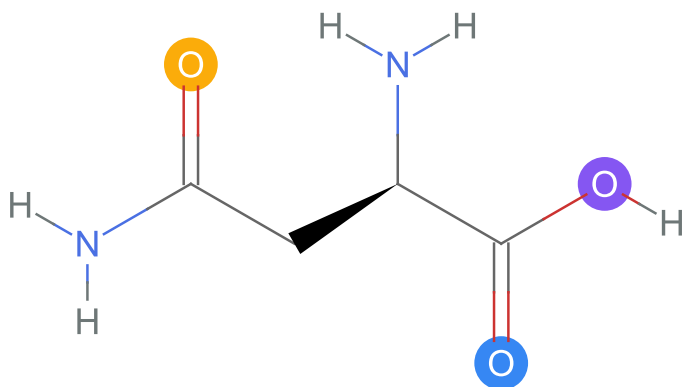
Si queremos resaltar el primer y tercer átomo de oxígeno:

```
In[*]:= MoleculePlot[Molecule["NC(=O)C[C@H](C(=O)O)N"], {3, 8}];
Out[*]=
```



O resaltar todos los átomos de oxígeno:

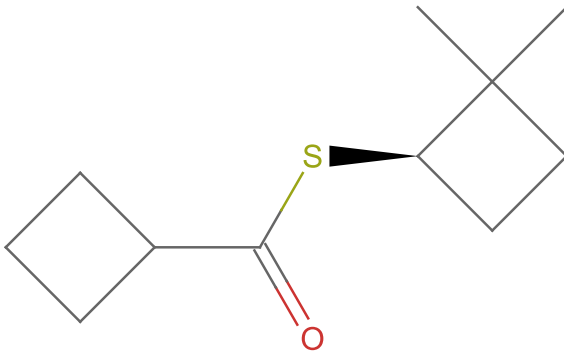
```
In[*]:= MoleculePlot[
  representación de molécula
  Molecule["NC(=O)C[C@H](C(=O)O)N"], Atom["O"]
  [molécula [····[cons·· [c·· [····[valo·· [átomo [notaci
Out[*]=
```



De la representación gráfica de una molécula determinada:

```
In[*]:= MoleculePlot[
  representación de molécula
  Molecule["O=C(C1CCC1)S[C@@H]1CCC1(C)C"] ]
  molécula      [··] constante      constante      [··] conste
```

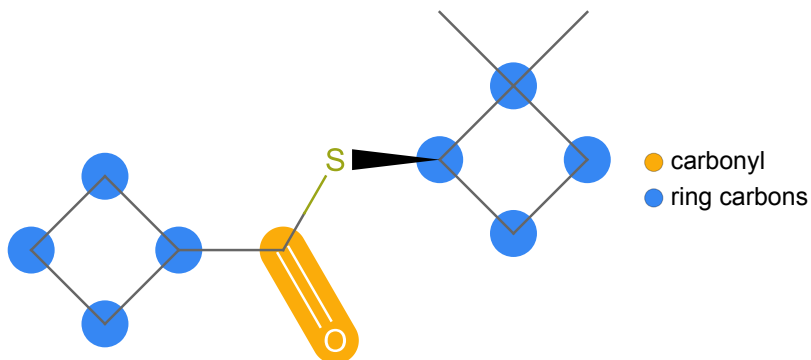
Out[*]=



Podemos seleccionar dos patrones diferentes de átomos:

```
In[*]:= MoleculePlot["O=C(C1CCC1)S[C@@H]1CCC1(C)C", <|
  representación de molécula      [n··] constante      constante      [c··] constante
  "carbonyl" → Bond[{"C", "O"}, "Double"],
  "ring carbons" →
  Atom["C", "RingAtomQ" → True] |>]
  átomo      constante      verdadero
```

Out[*]=



Un patrón puede coincidir con una o varias posiciones en una molécula:

```

In[ ]:= m = Molecule[{Atom["C"], Atom["C"],
  [molécula      [átomo [con··[átomo [constante
    Atom["C"], Atom["O"], Atom["N"], Atom["C"],
    [átomo [con··[átomo [nota··[átomo [valo··[átomo [constante
    Atom["O"], Atom["N"], Atom["C"], Atom["C"],
    [átomo [nota··[átomo [valo··[átomo [con··[átomo [constante
    Atom["C"], Atom["O"], Atom["O"], Atom["C"],
    [átomo [con··[átomo [nota··[átomo [nota··[átomo [constante
    Atom["N"], Atom["C"], Atom["C"], Atom["O"],
    [átomo [valo··[átomo [con··[átomo [con··[átomo [notación O
    Atom["O"], Atom["C"], Atom["C"], Atom["C"],
    [átomo [nota··[átomo [con··[átomo [con··[átomo [constante
    Atom["C"], Atom["C"], Atom["C"], Atom["C"],
    [átomo [con··[átomo [con··[átomo [con··[átomo [constante
    Atom["C"], Atom["H"], Atom["H"], Atom["H"],
    [átomo [con··[átomo      [átomo      [átomo
    Atom["H"], Atom["H"], Atom["H"], Atom["H"],
    [átomo      [átomo      [átomo      [átomo
    Atom["H"], Atom["H"], Atom["H"], Atom["H"],
    [átomo      [átomo      [átomo      [átomo
    Atom["H"], Atom["H"], Atom["H"], Atom["H"],
    [átomo      [átomo      [átomo      [átomo
    Atom["H"], Atom["H"], Atom["H"], Atom["H"]}],
    [átomo      [átomo      [átomo      [átomo
    {Bond[{1, 2}, "Single"], Bond[{2, 3}, "Single"],
    [enlace      [enlace
    Bond[{3, 4}, "Double"], Bond[{3, 5}, "Single"],
    [enlace      [enlace
    Bond[{5, 6}, "Single"], Bond[{6, 7}, "Double"],
    [enlace      [enlace
  
```

```

Bond[{6, 8}, "Single"], Bond[{8, 9}, "Single"],
Bond[{9, 10}, "Single"],
Bond[{10, 11}, "Single"], Bond[{11, 12},
"Double"], Bond[{11, 13}, "Single"],
Bond[{8, 14}, "Single"], Bond[{2, 15},
"Single"], Bond[{15, 16}, "Single"],
Bond[{16, 17}, "Single"], Bond[{17, 18},
"Double"], Bond[{17, 19}, "Single"],
Bond[{16, 20}, "Single"], Bond[{20, 21},
"Single"], Bond[{21, 22}, "Single"],
Bond[{22, 23}, "Aromatic"], Bond[{23, 24},
"Aromatic"], Bond[{24, 25}, "Aromatic"],
Bond[{25, 26}, "Aromatic"], Bond[{26, 27},
"Aromatic"], Bond[{10, 5}, "Single"],
Bond[{27, 22}, "Aromatic"], Bond[{1, 28},
"Single"], Bond[{1, 29}, "Single"],
Bond[{1, 30}, "Single"], Bond[{2, 31},
"Single"], Bond[{9, 32}, "Single"],

```

```

Bond[{9, 33}, "Single"], Bond[{10, 34},
  _enlace
  "Single"], Bond[{13, 35}, "Single"],
  _enlace
Bond[{14, 36}, "Single"], Bond[{14, 37},
  _enlace
  "Single"], Bond[{14, 38}, "Single"],
  _enlace
Bond[{15, 39}, "Single"], Bond[{16, 40},
  _enlace
  "Single"], Bond[{19, 41}, "Single"],
  _enlace
Bond[{20, 42}, "Single"], Bond[{20, 43},
  _enlace
  "Single"], Bond[{21, 44}, "Single"],
  _enlace
Bond[{21, 45}, "Single"], Bond[{23, 46},
  _enlace
  "Single"], Bond[{24, 47}, "Single"],
  _enlace
Bond[{25, 48}, "Single"], Bond[{26, 49},
  _enlace
  "Single"], Bond[{27, 50}, "Single"]},
  _enlace

```

StereochemistryElements →

elementos estereoquímicos

```

{<|"StereoType" → "Tetrahedral",
  "ChiralCenter" → 2, "Direction" → "Clockwise",
  _dirección
  "FiducialAtom" → 1, "Ligands" →
  {3, 15, 31}|>, <|"StereoType" → "Tetrahedral",
  "ChiralCenter" → 10, "Direction" →
  _dirección
  "Clockwise", "FiducialAtom" → 9, "Ligands" →

```

```

{11, 5, 34} |>, <|"StereoType" → "Tetrahedral",
"ChiralCenter" → 16, "Direction" →
  [dirección
  "Counterclockwise", "FiducialAtom" → 15,
  "Ligands" → {17, 20, 40} |>}];
carbonylPattern = Bond[{"C", "O"}, "Double"];
  [enlace [con···[notación O

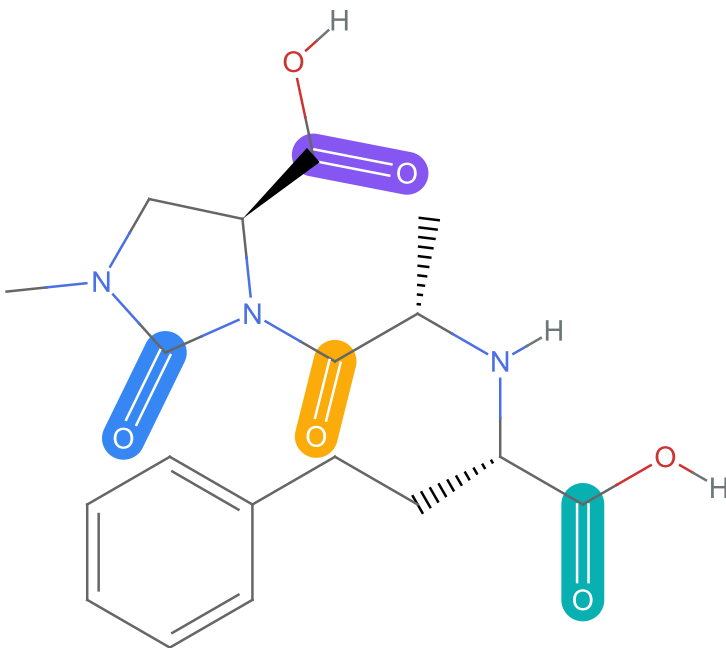
```

Podemos resaltar cada carbonilo por separado:

```

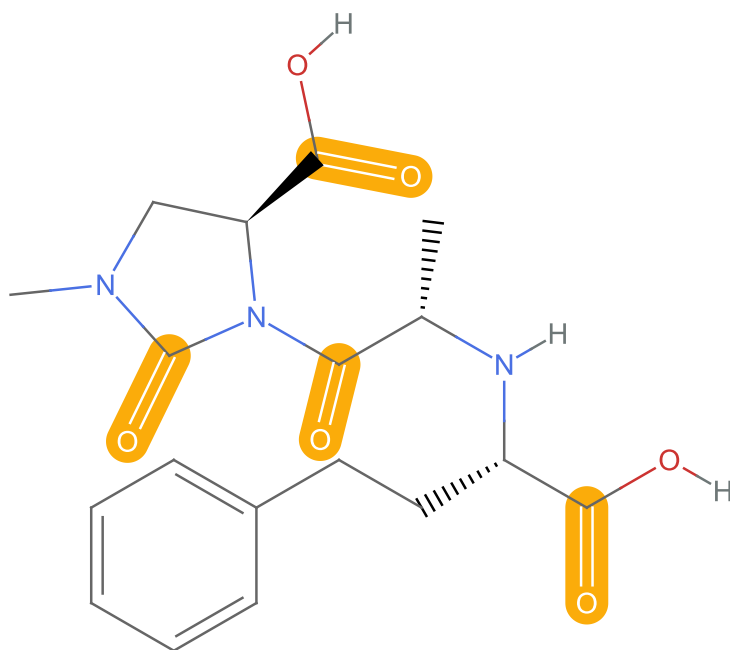
In[*]:= MoleculePlot[m, carbonylPattern]
  [representación de molécula
Out[*]=

```



O con un solo color:

```
In[*]:= MoleculePlot[m, {carbonylPattern}]  
[representación de molécula]  
Out[*]=
```



De una determinada molécula:

```

In[*]:= n = Molecule[{Atom["C"], Atom["N"], Atom["C"], Atom["C"], Atom["C"], Atom["N"],
  [molécula [átomo [con...[átomo [valo...[átomo [con...[átomo [con...[átomo [con...[átomo [valor nurr
    Atom["C"], Atom["O"], Atom["C"], Atom["C"], Atom["C"], Atom["C"],
    [átomo [con...[átomo [nota...[átomo [con...[átomo [con...[átomo [con...[átomo [constante
    Atom["H"], Atom["H"], Atom["H"], Atom["H"], Atom["H"], Atom["H"],
    [átomo [átomo [átomo [átomo [átomo [átomo
    Atom["H"], Atom["H"], Atom["H"], Atom["H"], Atom["H"], Atom["H"],
    [átomo [átomo [átomo [átomo [átomo [átomo
    Atom["H"], Atom["H"], Atom["H"], Atom["H"], Atom["H"], Atom["H"]}],
  {Bond[{1, 2}, "Single"], Bond[{2, 3}, "Single"], Bond[{3, 4}, "Single"],
  [enlace [enlace [enlace
    Bond[{4, 5}, "Single"], Bond[{5, 6}, "Single"], Bond[{6, 7}, "Single"],
  [enlace [enlace [enlace
    Bond[{7, 8}, "Double"], Bond[{7, 9}, "Single"], Bond[{9, 10}, "Double"],
  [enlace [enlace [enlace
    Bond[{9, 11}, "Single"], Bond[{2, 12}, "Single"], Bond[{1, 13}, "Single"],
  [enlace [enlace [enlace
    Bond[{1, 14}, "Single"], Bond[{1, 15}, "Single"], Bond[{3, 16}, "Single"],
  [enlace [enlace [enlace
    Bond[{3, 17}, "Single"], Bond[{4, 18}, "Single"], Bond[{4, 19}, "Single"],
  [enlace [enlace [enlace
    Bond[{5, 20}, "Single"], Bond[{5, 21}, "Single"], Bond[{6, 22}, "Single"],
  [enlace [enlace [enlace
    Bond[{10, 23}, "Single"], Bond[{10, 24}, "Single"], Bond[{11, 25}, "Single"],
  [enlace [enlace [enlace
    Bond[{11, 26}, "Single"], Bond[{11, 27}, "Single"], Bond[{12, 28}, "Single"],
  [enlace [enlace [enlace
    Bond[{12, 29}, "Single"], Bond[{12, 30}, "Single"]}}];
  [enlace [enlace

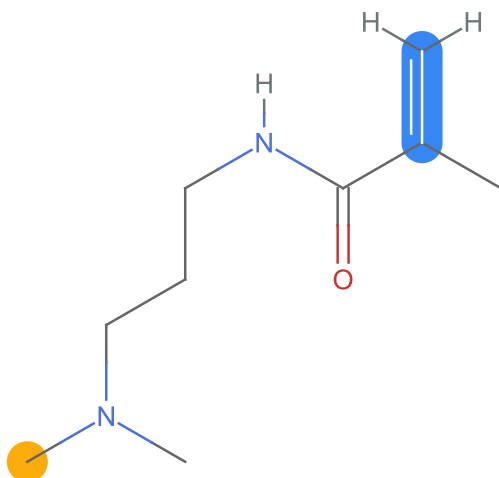
```

Podemos resaltar varios patrones:

```

In[*]:= MoleculePlot[n, {1, Bond[{"C", "C"}, "Double"]}
[representación de molécula [enlace [con...[constante
Out[*]=

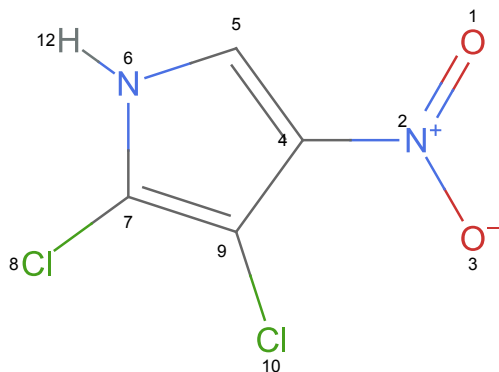
```



Podemos etiquetar todos los átomos por su índice:

```
In[*]:= MoleculePlot[Molecule["2,3-dichloro-4-nitro-1H-pyrrole"],
[representación d... [molécula]
AtomLabels -> "AtomIndex"
[etiquetas de átomos]
```

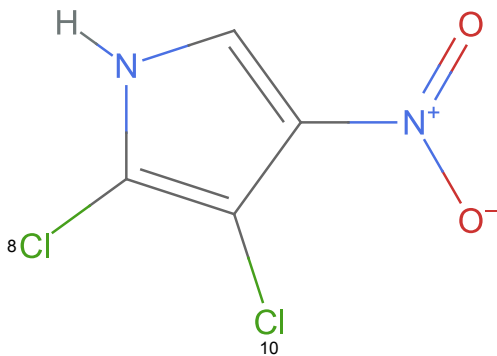
Out[*]=



Podemos etiquetar solo unos determinados átomos, como por ejemplo los de cloro:

```
In[*]:= MoleculePlot[Molecule["2,3-dichloro-4-nitro-1H-pyrrole"],
[representación d... [molécula]
AtomLabels -> {Atom["Cl"] -> "AtomIndex"}]
[etiquetas de áto... [átomo]
```

Out[*]=



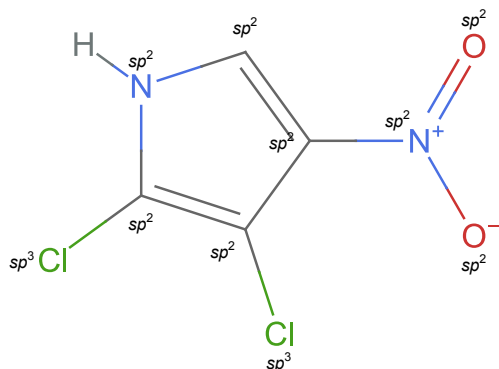
Etiquete los átomos que no son de hidrógeno por su hibridación:

```

In[*]:= MoleculePlot[Molecule["2,3-dichloro-4-nitro-1H-pyrrole"],
  [representación d... [molécula]
  AtomLabels -> {Atom[Except["H"]] -> MoleculeProperty["OrbitalHybridization"]}]
  [etiquetas de átom... [átomo] [excepto] [propiedad de molécula]

```

Out[*]=



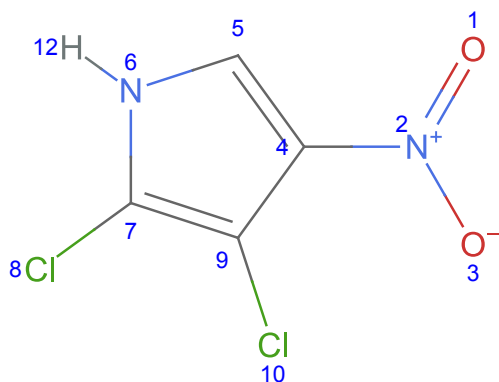
Podemos configurar todas las etiquetas para que tengan el mismo estilo:

```

In[*]:= MoleculePlot[Molecule["2,3-dichloro-4-nitro-1H-pyrrole"],
  [representación d... [molécula]
  AtomLabels -> "AtomIndex", AtomLabelStyle -> Directive[FontSize -> 12, Blue]]
  [etiquetas de átomos] [estilo de etiqueta de átomos] [directiva] [tamaño de tipo de ... [azul]

```

Out[*]=



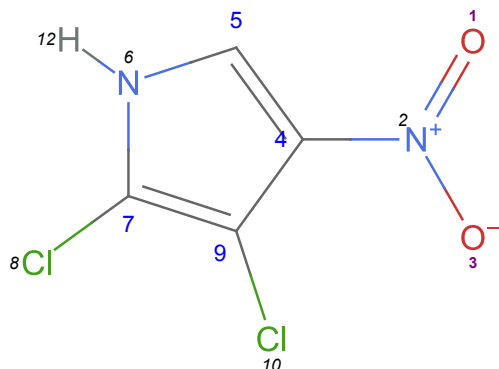
Establezca el estilo de la etiqueta según el tipo de átomo:

```

In[*]:= MoleculePlot[Molecule["2,3-dichloro-4-nitro-1H-pyrrole"],
  representación d... [molécula]
  AtomLabels → "AtomIndex", AtomLabelStyle → {Atom["C"] → Directive[12, Blue],
  Etiquetas de átomos           [estilo de etiqueta de át... [átomo [cons... [directiva [azul]
  Atom["O"] → Directive[8, Purple, Bold], _ → Italic]}
  [átomo [notac... [directiva [púrpura [negrita [itálica]

```

Out[*]=



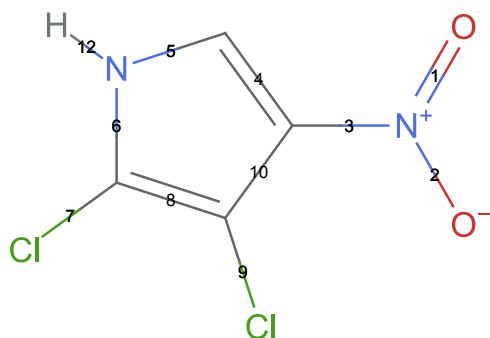
Etiquete todos los enlaces por su índice:

```

In[*]:= MoleculePlot[Molecule["2,3-dichloro-4-nitro-1H-pyrrole"],
  representación d... [molécula]
  BondLabels → "BondIndex"
  Etiquetas de enlaces

```

Out[*]=



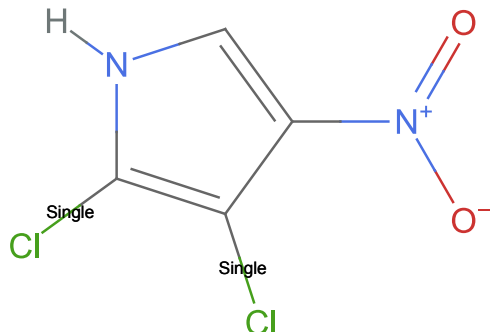
Etiquete solo los enlaces a átomos de cloro por su tipo de enlace:

```

In[*]:= MoleculePlot[Molecule["2,3-dichloro-4-nitro-1H-pyrrole"],
  [representación d... [molécula]
  BondLabels -> {Bond[{"Cl", _]} -> MoleculeProperty["BondType"]}
  [etiquetas de enla... [enlace] [propiedad de molécula]

```

Out[*]=



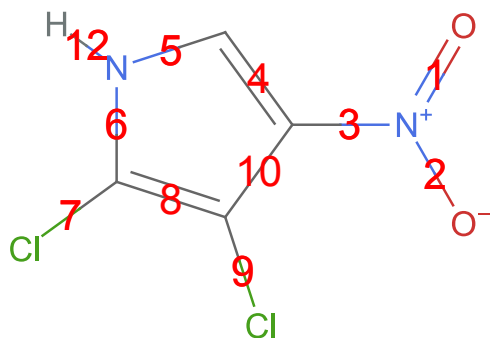
Podemos dar a todas las etiquetas de enlace un mismo estilo:

```

In[*]:= MoleculePlot[Molecule["2,3-dichloro-4-nitro-1H-pyrrole"],
  [representación d... [molécula]
  BondLabels -> "BondIndex", BondLabelStyle -> Directive[FontSize -> 22, Red]
  [etiquetas de enlaces] [estilo de etiqueta de e... [directiva] [tamaño de tipo de ... [rojo]

```

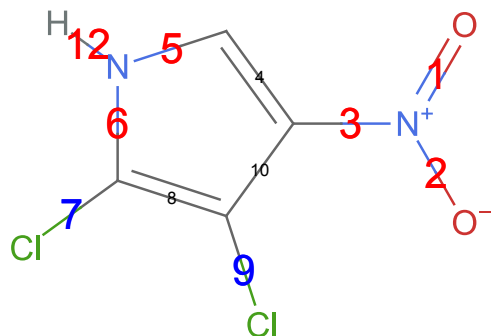
Out[*]=



O etiquetar los enlaces de forma diferente según sus átomos:

```
In[*]:= MoleculePlot[Molecule["2,3-dichloro-4-nitro-1H-pyrrole"],  
  [representación d... [molécula  
  BondLabels → "BondIndex",  
  [etiquetas de enlaces  
  BondLabelStyle → {Bond[{"N", _]} → Directive[FontSize → 22, Red],  
  [estilo de etiqueta de enl... [enlace [valor numé... [directiva [tamaño de tipo de ... [rojo  
  Bond[{"Cl", _]} → Directive[FontSize → 22, Blue]}}]  
  [enlace [directiva [tamaño de tipo de ... [azul
```

Out[*]=



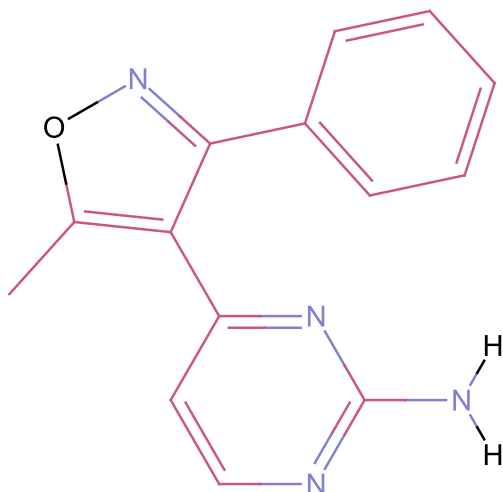
Podemos especificar diferentes colores para los elementos atómicos:

```

In[*]:= MoleculePlot["Nc1nccc(n1)c1c(C)onc1c1cccc1", ColorRules →
  [representación de molécula           [constante           [reglas de color
    {"C" → RGBColor[0.79, 0.34, 0.5], "N" → RGBColor[0.5, 0.51, 0.81], _ → Black}]
    [con·· [color RGB           [valo·· [color RGB           [negro
  ]

```

Out[*]=



Podemos utilizar marcadores de posición para las leyendas de la trama:

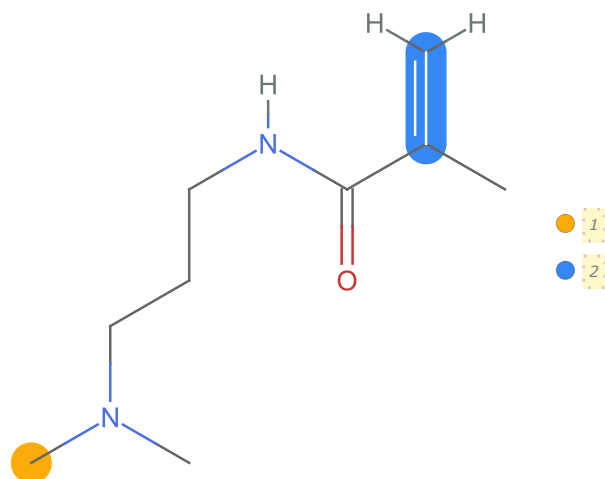
```

In[*]:= o = Molecule[{Atom["C"], Atom["N"], Atom["C"], Atom["C"], Atom["C"], Atom["N"],
  [molécula [átomo [con...átomo [valo...átomo [con...átomo [con...átomo [con...átomo [valor num
    Atom["C"], Atom["O"], Atom["C"], Atom["C"], Atom["C"], Atom["C"],
    [átomo [con...átomo [nota...átomo [con...átomo [con...átomo [con...átomo [constante
    Atom["H"], Atom["H"], Atom["H"], Atom["H"], Atom["H"], Atom["H"],
    [átomo [átomo [átomo [átomo [átomo [átomo
    Atom["H"], Atom["H"], Atom["H"], Atom["H"], Atom["H"], Atom["H"],
    [átomo [átomo [átomo [átomo [átomo [átomo
    Atom["H"], Atom["H"], Atom["H"], Atom["H"], Atom["H"], Atom["H"]}],
  {Bond[{1, 2}, "Single"], Bond[{2, 3}, "Single"], Bond[{3, 4}, "Single"],
  [enlace [enlace [enlace
    Bond[{4, 5}, "Single"], Bond[{5, 6}, "Single"], Bond[{6, 7}, "Single"],
  [enlace [enlace [enlace
    Bond[{7, 8}, "Double"], Bond[{7, 9}, "Single"], Bond[{9, 10}, "Double"],
  [enlace [enlace [enlace
    Bond[{9, 11}, "Single"], Bond[{2, 12}, "Single"], Bond[{1, 13}, "Single"],
  [enlace [enlace [enlace
    Bond[{1, 14}, "Single"], Bond[{1, 15}, "Single"], Bond[{3, 16}, "Single"],
  [enlace [enlace [enlace
    Bond[{3, 17}, "Single"], Bond[{4, 18}, "Single"], Bond[{4, 19}, "Single"],
  [enlace [enlace [enlace
    Bond[{5, 20}, "Single"], Bond[{5, 21}, "Single"], Bond[{6, 22}, "Single"],
  [enlace [enlace [enlace
    Bond[{10, 23}, "Single"], Bond[{10, 24}, "Single"], Bond[{11, 25}, "Single"],
  [enlace [enlace [enlace
    Bond[{11, 26}, "Single"], Bond[{11, 27}, "Single"], Bond[{12, 28}, "Single"],
  [enlace [enlace [enlace
    Bond[{12, 29}, "Single"], Bond[{12, 30}, "Single"]}}];

In[*]:= MoleculePlot[o, {1, Bond[{"C", "C"}, "Double"]}, PlotLegends -> Automatic]
[representación de molécula [enlace [con...constante [leyendas de repr... automático]

```

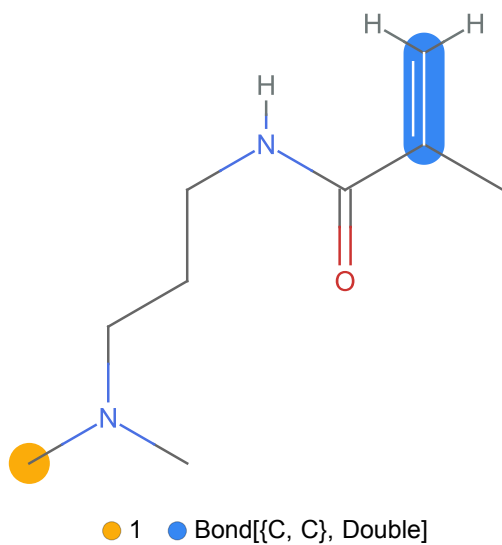
Out[*]=



Podemos colocar las leyendas donde queramos:


```
In[*]:= MoleculePlot[0, {1, Bond[{"C", "C"}, "Double"]},  
[representación de molécula [enlace [con... [constante  
PlotLegends -> Placed["Expressions", Below]]  
[leyendas de repr... [colocado [debajo
```

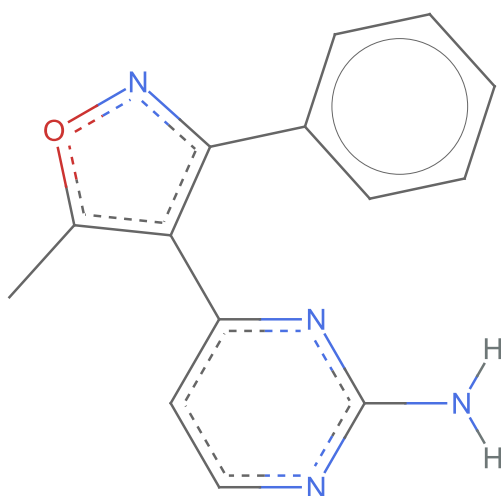
Out[*]=



Por defecto, los enlaces aromáticos se muestran en su forma Kekule deslocalizada. Utilice el tema argumental "Aromático" para mostrar qué enlaces son aromáticos. Los anillos de fenilo se muestran con un círculo para indicar los electrones de enlace deslocalizados. Los heterociclos aromáticos utilizan líneas discontinuas para los enlaces aromáticos:

```
In[*]:= MoleculePlot["Nc1nccc(n1)c1c(C)onc1c1ccccc1", PlotTheme -> "Aromatic"]  
[representación de molécula [constante [tema de representación]
```

Out[*]=



Podemos combinar diferentes temas de la trama:

```
in[*]:= MoleculePlot["Nc1nccc(n1) c1c(C)onc1c1cccc1",  
  [representación de molécula] [constante]  
  PlotTheme -> {"Aromatic", "AllAtom", "Monochrome"}]  
  [tema de representación]
```

Out[*]=

